

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**DETERMINAÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES DE EQUILÍBRIO EM
MEIOS POROSOS INDEFORMÁVEIS**

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
ENGENHARIA MECÂNICA

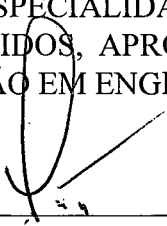
Fábio Santana Magnani

Florianópolis, maio de 1996

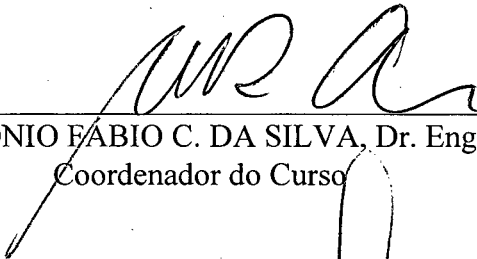
DETERMINAÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES DE EQUILÍBRIO EM MEIOS POROSOS INDEFORMÁVEIS

FÁBIO SANTANA MAGNANI

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR EM ENGENHARIA, ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO FLUIDOS, APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA.

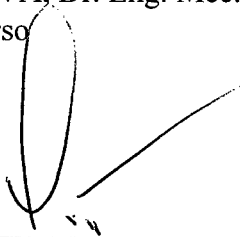


Prof. PAULO CÉSAR PHILIPPI, Dr. Ing.
Orientador



Prof. ANTÔNIO FÁBIO C. DA SILVA, Dr. Eng. Mec.
Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA:



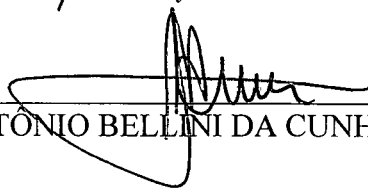
Prof. PAULO CÉSAR PHILIPPI, Dr. Ing. - Presidente




Prof. ÁLVARO TOUBES PRATA, Ph.D.



Eng. CELSO PERES FERNANDES, Dr. Eng. Mec.



Prof. JOSÉ ANTÔNIO BELLINI DA CUNHA NETO, Dr.



Prof. KRISHNASWAMY RAJAGOPAL, Ph.D.



Eng. RÉGIS KRÜEL ROMEU, Dr.

À minha mulher, Jade, pela nossa vida.
À minha filha, Gabriela, pela alegria de viver.
Aos meus pais, Amadeu e Neide, pela dedicação.

AGRADECIMENTOS

Ao Philippi, pela liberdade, pela postura. Por ser um Mestre.

Ao Celso, por ter se arriscado ao abrir um caminho que agora traço com segurança. Pela amizade.

Ao Roberto Gaiser, por fazer o sistema computacional do laboratório funcionar sempre que foi necessário.

Ao André Bueno, Bellini, Fernando Boçon, Lamberts, Liang, Luis Mauro, Saulo, Vicente e bolsistas do LMPT, por toda ajuda que eu, injustamente, não consigo descrever.

Ao CENPES, pelo problema a ser resolvido, pelas micrografias e dados de intrusão de mercúrio.

À CAPES e CNPq, pela bolsa concedida, sem a qual este trabalho não poderia ter sido executado.

E a todos aqueles que, justamente por me ajudarem sem interesse algum, não consigo me lembrar.

SUMÁRIO

Simbologia	VIII
Lista de Figuras	X
Resumo	XIV
Abstract	XV
Introdução	1
Capítulo 1- Problema Físico	
1.1- Introdução	9

1.2- Sistema	10
1.3- Fluidos	12
1.4- Processo	13
1.5- Fenômenos	16

Capítulo 2 - Representação Geométrica

2.1- Introdução	25
2.2- Regiões Indeformáveis	27
2.3- Regiões Fluídicas	31
2.4- O Problema em Sua Representação Geométrica	37

Capítulo 3 - Solução Proposta

3.1- Introdução	39
3.2- Dados	40
3.3- Regiões Auxiliares	42
3.4- Solução Proposta	46
3.5- Verificação da Solução	48
3.6- Comentários sobre a Verificação da Solução	55
3.7- Exemplos	56
3.7.1- Intrusão de Mercúrio	57
3.7.2- Embebição de Água em um Sistema Água-Óleo	58

Capítulo 4 - Técnicas

4.1- Introdução	61
4.2- Correção Posterior das Pressões para se considerar o Ângulo de Contato	63
4.3- Dados	64
4.4- Técnica para Simulação dos Processos	67
4.5- Obtenção de d_x (Utilizando a Métrica Euclidiana)	67
4.6- Obtenção de d_x (Utilizando a Métrica d-345)	70

4.7- Obtenção de G^i	72
4.8- Obtenção de Componentes Conexos de Interesse	76
4.9- Comentários Finais	79
 Capítulo 5 - Resultados	
5.1- Introdução	80
5.2- Amostra	81
5.3- Método de Reconstrução de Joshi	84
5.4- Comparação entre o Meio Reconstruído e a Amostra	85
5.5- Simulação de Intrusão	90
5.6- Simulação de Embebição	97
5.7- Simulação de Invasão	101
5.8- Comentários Finais sobre a Simulação	103
 Capítulo 6 - Conclusões	105
 Referências Bibliográficas	108
 Apêndice A - Algoritmos	114
 Apêndice B - Método de Reconstrução de Joshi	132

SIMBOLOGIA

A	Região Fluido A
B	Região Fluido B
c	Compressibilidade
C	Curvatura
d	Distância
E	Bola
F	Região Fase Fluídica
G	Região Verde
<u>G</u>	Região Verde Complementar
g	Gravidade [m/s²]
I	Interface
L	Região Meio Livre
M	Região Meio Poroso
nm	Não Molhamento

p	Pressão [Pa]
P	Região Fase Poro
r	Raio
R^3	Espaço Euclidiano Tridimensional
S	Região Fase Sólida
T	Região Parede
U	Região Universo
V	Volume
Y	Região Amarela
Z^3	Espaço Discreto Tridimensional

SÍMBOLOS GREGOS

ε	Comprimento de Escala [m]
θ	Ângulo de Contato [rad]
ρ	Massa Específica [kg/m ³]
σ	Tensão Interfacial [kg/s ²]

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura I.1- Representação de uma seção plana de um meio poroso	05
Figura I.2- Resultado da operação de abertura	07
Figura 1.1- Sistema para a obtenção de dados de intrusão de mercúrio	10
Figura 1.2- Processo de equilíbrio e primário (intrusão de mercúrio).	11
Figura 1.3- Processo em que um dos fluidos está em mais de uma câmara.	14
Figura 1.4- Sistema em que existe interface entre fluidos nas câmaras	15
Figura 1.5- Cilindro de Raio R.	17
Figura 1.6- Perfil da interface no interior de um cilindro obtida pela solução da equação de Young-Laplace para superfícies de revolução	19
Figura 1.7- Caso em que a interface possui curvatura não definida em um ponto (ou linha).	20
Figura 1.8- Tipo de cavidade onde são possíveis várias interfaces em equilíbrio	20
Figura 1.9- Tipo de cavidade onde apenas uma interface está em equilíbrio	21
Figura 1.10- Possíveis caminhos para alcançar uma configuração de equilíbrio	22
Figura 1.11 - Configurações de Equilíbrio para o Caso de um Fluido Não Molhante	

Adentrando uma Cavidade	23
Figura 1.12 - Configurações de Equilíbrio para o Caso de um Fluido Molhante	
Adentrando uma Cavidade	24
Figura 2.1 - Sistema de drenagem de água	27
Figura 2.2 - Região Meio Poroso utilizando uma região simples	28
Figura 2.3 - Região Meio Poroso utilizando região simples e configuração inicial	29
Figura 2.4- Representação geométrica do sistema de drenagem de água	30
Figura 2.5- Regiões Fluídicas	32
Figura 2.6- Visualização do Ângulo de Contato	34
Figura 3.1 - Exemplo de um sistema. A região cinza representa a câmara, a região preta representa o poro e a região branca representa o sólido	43
Figura 3.2 - União das regiões E^*_x para o sistema da Figura 3.1. A região cinza representa a união das regiões E^*_x , a região branca representa o sólido.	44
Figura 3.3 - Região G^i para o sistema da Figura 3.1	45
Figura 3.4 - Exemplo das regiões auxiliares	46
Figura 3.5 - Fluido não-molhante adentrando as cavidades	47
Figura 3.6 - Fluido molhante adentrando as cavidades	48
Figura 3.7 - Exemplo de regiões $(\cup_x E^*_x)$	51
Figura 3.8 - Casos em que existe (b) e não existe (a) erro no ângulo de contato provocado pela superfície da matriz sólida	53
Figura 3.9 - Casos em que existe (b) e não existe (a) erro no ângulo de contato provocado pela insuficiência de espessura da matriz sólida	53
Figura 3.10- Solução para o caso $nm(\theta_{AB})=1$	54
Figura 3.11 - Exemplo de Insuficiência de Tamanho das Câmaras	54
Figura 3.12 - Passo 0 de um processo de intrusão de mercúrio	57
Figura 3.13 - Passo 1 de um processo de intrusão de mercúrio	57
Figura 3.14 - Passo 2 de um processo de intrusão de mercúrio	58
Figura 3.15 - Passo 0 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo	59
Figura 3.16 - Passo 1 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo	59
Figura 3.17 - Passo 2 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo	60
Figura 3.18 - Passo 3 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo	60

Figura 4.1- Diferença das interfaces quando se contorna o problema causado pela insuficiência de espessura da matriz sólida	64
Figura 4.2 - Sistema Utilizado. A cor branca representa as câmaras, a cor preta representa o sólido e a cor cinza representa o meio poroso	65
Figura 4.3- Exemplo de um Sistema. O branco representa a região fluídica, o cinza claro representa a matriz sólida e o cinza escuro representa as paredes.	66
Figura 4.4 - Representação Ternária do Sistema Exemplo. O valor 0 representa o sólido e o valor 1 representa a região fluídica	66
Figura 4.5- Determinação das distâncias das células elementares em relação a um ponto de origem	68
Figura 4.6- DRQF do Sistema Exemplo	70
Figura 4.7- DRF do Sistema Exemplo	72
Figura 4.8 - Seções de uma Bola de raio 2 (utilizando a métrica euclidiana)	73
Figura 4.9 - Seções de uma Bola de raio 2 (utilizando a métrica d_{345})	73
Figura 4.10- Região $(\cup_x E^* i_x)$ para $r^i = 3$	75
Figura 4.11- Bolas Discretas de Raio 2 Inclusas numa Bola de Raio 3	76
Figura 4.12- Bola Euclidiana Inclusa numa Bola Maior	76
Figura 4.13- Regiões $G^i \cap P$ (verde), $B^i \cap L$ (azul) e $A^i \cap L$ (vermelho)	77
Figura 4.14- Região A^0 (azul), A^1 (azul e verde) e A^2 (azul, verde e vermelho) para um Processo de Embebição	77
Figura 5.1 - Imagem Digital de um material Berea 500 mD	81
Figura 5.2 - Imagem Digital Binarizada de um material Berea 500 mD	82
Figura 5.3- Covariograma da Amostra	83
Figura 5.4- Distribuição de Volume de Poros da Amostra	84
Figura 5.5- Comparação entre os covariogramas das matrizes reconstruídas e o covariograma da amostra	85
Figura 5.6 - Comparação entre a distribuição de volume de poros da amostra e a distribuição de volume de poros (por seção) das matrizes reconstruídas	86
Figura 5.7- Distribuição de Volume de Poros das matrizes A, B e C (100x100x100) utilizando as métricas euclidiana e d_{345}	87
Figura 5.8- Distribuição de Volume de Poros das matrizes D, E e F (150x150x150)	

utilizando as métricas euclidiana e d_{345}	88
Figura 5.9 - Comparação entre as distribuições de volume de poros tridimensional e bidimensional (por seção) das matrizes A, B e C (100x100x100)	89
Figura 5.10 - Comparação entre as distribuições de volume de poros tridimensional e bidimensional (por seção) das matrizes D, E e F (150x150x150)	89
Figura 5.11 - Sistema em que a intrusão do mercúrio se dá por apenas uma face (sistema 1)	90
Figura 5.12- Sistema em que a intrusão de mercúrio se dá por todas as faces (sistema 2)	91
Figura 5.13- Comparação entre as matrizes (100x100x100) e (150x150x150) utilizando as curvas de volume de mercúrio no sistema 1 (intrusão por uma face)	92
Figura 5.14- Comparação entre as matrizes (100x100x100) e (150x150x150) utilizando as curvas de volume de mercúrio no sistema 2 (intrusão por todas as faces)	93
Figura 5.15- Comparação entre os sistemas 1 (intrusão por uma face) e 2 (intrusão por todas as faces) para as matrizes (100x100x100)	94
Figura 5.16- Comparação entre os sistemas 1 (intrusão por uma face) e 2 (intrusão por todas as faces) para as matrizes (150x150x150)	95
Figura 5.17- Comparação entre os resultados das simulações e os resultados experimentais	96
Figura 5.18 - Seções de um sistema em um processo de embebição ($r=1$)	98
Figura 5.19- Seções de um sistema em um processo de embebição ($r=3$)	99
Figura 5.20- Embebição de um fluido molhante	100
Figura 5.21- Invasão de fluido não molhante	101
Figura 5.22- Comparação dos resultados da simulação do processo de invasão de fluido não molhante considerando a conectividade do fluido molhante como consequência da geometria (incompressível) e considerando a conectividade do fluido molhante como existente à priori (compressível) utilizando como meio poroso as matrizes (100x100x100)	102
Figura 5.23- Comparação dos resultados da simulação do processo de invasão de fluido não molhante considerando a conectividade do fluido molhante como consequência da geometria (incompressível) e considerando a conectividade do fluido molhante como existente à priori (compressível) utilizando como meio poroso as matrizes (150x150x150)	103

RESUMO

O objetivo deste trabalho é a determinação das interfaces entre fluidos no interior das cavidades de meios porosos indeformáveis, utilizando técnicas geométricas. Para tanto o problema físico de determinação das interfaces é transformado em um problema geométrico, onde a solução são regiões que representam os fluidos envolvidos no processo. A principal característica deste método é a não necessidade de simplificação da geometria, exceto pela sua discretização.

Simulam-se processos de invasão de fluidos molhantes e não-molhantes em meios porosos preenchidos inicialmente com fluidos idealmente compressíveis ou incompressíveis. Utiliza-se como geometria uma matriz reconstruída a partir de micrografias do material Berea 500 mD. A partir dos resultados das simulações, conclui-se que, ao menos para este material, o volume residual é maior no caso da invasão de fluido molhante, e é verificada como boa a hipótese de que o fluido molhante seja necessariamente conectado às câmaras, através das rugosidades.

ABSTRACT

The main purpose of the present work is the determination of the interfaces, between fluids, inside indeformable porous media cavities, using geometrical techniques. For this purpose, the physical problem is transformed into a geometrical one, and the solution are the regions representing the participating fluids. The main relevance of the present method is the unnecessary of simplifying the geometry, excepting for its discretisation.

Fluid invasion is simulated for wetting and non-wetting fluids in porous media, initially occupied by fluids which are assumed ideally compressible or ideally incompressible. A matrix reconstructed from plane sections of 500 mD Berea sandstone is used. The results indicate that, for this material: i) the residual volume is greater after a wetting fluid invasion process, as compared with a non-wetting fluid invasion, and ii) as usually assumed, the wetting fluid can be considered to constitute a single connected phase in the whole porous 3D domain; this connection is carried out through the roughness of the pore surfaces.

INTRODUÇÃO

O problema geral da área de Engenharia em Meios Porosos é a previsão de fenômenos físico-químicos cuja origem se dá no interior da estrutura porosa. As abordagens a este problema podem ser classificadas em relação ao comprimento de escala, ϵ , de observação do meio poroso. Basicamente os tipos de abordagens puras são: abordagem macroscópica e abordagem microscópica.

No caso de uma abordagem macroscópica, ϵ deve ser definido grande o suficiente para representar estatisticamente a matriz sólida e o espaço poroso, de maneira a poder-se definir em seu interior propriedades macroscópicas como condutividade hidráulica, permeabilidade, entre outras. Ou seja, renuncia-se à complexidade da microgeometria do meio poroso, embutindo esta informação nas propriedades. Por outro lado, ϵ deve ser pequeno o suficiente para que em seu interior as propriedades citadas acima não possuam grandes gradientes, sob pena de distorcer a solução. Estas limitações acontecem mesmo numa representação diferencial, pois esta, para levar em conta gradientes muito altos, torna-se necessário considerar o meio como homogêneo numa escala onde ele não o é, distorcendo o comportamento do sistema. Quando não se pode definir ϵ ,

não é possível a utilização da abordagem macroscópica. Os modelos fenomenológicos, como o proposto por Philip e de Vries (1957), utilizam a abordagem macroscópica. As grandes vantagens da abordagem macroscópica são o tamanho do meio poroso simulado, que pode ser o tamanho real do meio, e a simplicidade dos modelos, que, basicamente, utilizam a equação de Darcy, e que permitem a simulação de processos dinâmicos. As desvantagens são a dificuldade (ou incapacidade) destes modelos em prever fenômenos de origem microscópica, como os *fingers*, Posadas e Crestana (1991), ou fenômenos próximos à frente de invasão de um dos fluidos, Yang Xuefeng (1995), e ainda, a necessidade de dados específicos dependentes não apenas do meio poroso mas também dos fluidos envolvidos.

Existem várias abordagens microscópicas, em função do comprimento de escala utilizado. O interesse aqui reside na abordagem onde o comprimento de escala é grande o suficiente para que em seu interior propriedades como viscosidade, tensão superficial, possam ser definidas; e pequeno o suficiente para poder representar de forma bem definida cada uma das substâncias simples do sistema, bem como suas interfaces. Esta abordagem pode ser chamada de abordagem microscópica em nível do poro. Desta forma, não é possível a utilização desta abordagem quando as dimensões da cavidade ou da matriz sólida são da ordem do caminho médio das moléculas envolvidas. Modelos utilizando a equação de Navier-Stokes no interior de cavidades, Adler, Jacquin e Quiblier (1990), e modelos baseados na teoria de redes (onde as malhas representam a estrutura microscópica do meio), Parlar e Yortsos (1988), utilizam a abordagem microscópica em nível do poro. As vantagens de modelos que utilizam esta abordagem microscópica em nível do poro são que para a previsão de fenômenos, é necessária “apenas” a obtenção da geometria do meio (observe-se, todavia, que a geometria do meio é função do comprimento de escala utilizado), uma vez que propriedades como viscosidade, tensão superficial e atrações físicas entre fluidos e sólidos são “clássicas”; e que estes modelos podem permitir o estudo dos fenômenos de origem microscópicas. A desvantagem destes modelos é a incapacidade de simular, na maioria das vezes, o meio poroso como um todo, devido ao grande detalhamento necessário da microgeometria.

Os dados geométricos utilizados por modelos baseados na abordagem em nível do poro, podem ser classificados quanto à obtenção experimental. Estes dados podem ser classificados como fenomenológicos - quando a geometria é obtida a partir de dados experimentais macroscópicos, como dados de intrusão de mercúrio ou de adsorção de vapor d'água - ou como dados pontuais - quando a geometria é obtida a partir de dados experimentais microscópicos,

como reflexão ou transmissão de luz. Por exemplo, um modelo de rede pode utilizar dados fenomenológicos, Xu, Daian e Quenard (1995) ou pontuais, Fernandes et alii (1996), dependendo da maneira como as informações da microgeometria são obtidas. A característica principal dos dados fenomenológicos é que a geometria obtida fica dependente do tipo de fenômeno, fazendo com que esta geometria sirva muito bem à simulação de fenômenos suficientemente parecidos, mas tenha dificuldade em simular fenômenos diferentes. A principal característica dos dados pontuais é a independência da geometria aos fenômenos. Esta geometria é mais parecida com a geometria real, permitindo a simulação de muitos fenômenos, desde que esta geometria seja obtida de forma correta; o que não é nem simples nem absoluto.

Os modelos baseados na abordagem microscópica em nível do poro podem ser classificados quanto à utilização da geometria. Estes podem ser determinísticos, quando a geometria é utilizada como uma função de fase, ou seja, cada ponto do espaço que representa o meio poroso é ou poro ou matriz sólida; ou modelos estatísticos, onde se conhecem apenas características estatísticas da geometria, como distribuição de volume, conectividade, porosidade, etc. A característica principal dos modelos determinísticos em relação à utilização da geometria é a possibilidade de análise de fenômenos locais. A principal característica dos modelos estatísticos é o estudo de fenômenos macroscópicos, porém com modelos que possuem informações acerca dos fenômenos locais. Utilizando novamente o exemplo de modelos de rede, estes podem ser determinísticos, como nas redes cúbicas, Wall e Brown (1981), ou estatísticos, como nas redes de Bethe, Parlar e Yortsos (1988), e nas redes cúbicas, Kirkpatrick (1973).

Os modelos que utilizam uma abordagem microscópica em nível do poro podem ainda ser divididos em modelos que privilegiam os fenômenos locais em cada cavidade e em modelos que privilegiam a conectividade entre as cavidades. Modelos como os utilizados por Cohan (1938), Everett e Haines (1972), Mason e Morrow (1986 e 1987), Brunauer, Emmett e Teller (1938) e Langmuir (1918) privilegiam o estudo dos fenômenos de capilaridade ou de adsorção no interior de cavidades únicas que possuem geometria simplificada. Estes modelos permitem apenas o estudo qualitativo dos fenômenos, uma vez que a geometria é simplificada e os modelos não contêm informações sobre a conectividade entre as cavidades.

Modelos de rede utilizam ainda simplificações na geometria das cavidades, mas consideram a integração entre as cavidades. Ou seja, utilizam redes nas quais os nós e as ligações são, por exemplo, as cavidades e as gargantas da microestrutura. Modelos como os utilizados por Parlar e Yortsos (1988), Wall e Brown (1981), Souza (1993), utilizam redes regulares em apenas uma

escala, o que restringe bastante a representatividade da distribuição de volume de poros (para os meios em que a distribuição é larga) e a conectividade do meio. Modelos como utilizados por Fernandes et alii (1996) e Daian (1992) utilizam redes multiescalas, o que permite uma boa representatividade da distribuição de poros, mas, no entanto, ainda restringe a conectividade. Modelos como o utilizado por Blunt e King (1991) utilizam redes irregulares, permitindo boa representatividade da conectividade, mas podendo restringir a distribuição de volumes (embora sejam menos restritivos neste aspecto do que os modelos de rede regular). Os modelos de rede, embora em alguns casos possam representar bem a conectividade e a distribuição de volume de poros, encontram como maior limitação a simplificação da geometria dos poros, que comumente são considerados como cilíndricos, esféricos ou paralelepipedais.

O método proposto neste trabalho é baseado na abordagem microscópica em nível de poro, e é determinístico em relação à utilização da geometria. Embora nas simulações realizadas a geometria seja obtida de maneira pontual, o método é indiferente a isto. Ou seja, o método privilegia o estudo de fenômenos locais às custas de restringir o tamanho do meio poroso que pode ser simulado. A principal diferença do modelo proposto em relação aos modelos de cavidade única e aos modelos de rede é a não simplificação da geometria do meio.

Agora que o método proposto foi situado no universo dos métodos possíveis aplicados ao estudo de meios porosos, passa-se a expor, em linhas gerais, seus objetivos, características e simplificações. Este trabalho dedica-se à determinação das interfaces em sistemas que se encontram no estado de equilíbrio mecânico. Chama-se este processo de determinação das configurações de equilíbrio. Em linhas gerais, o que se pretende com o presente trabalho é o desenvolvimento de um método para o estudo de processos de equilíbrio em meios porosos. Esta metodologia possui três etapas bem definidas. A primeira etapa é a representação geométrica dos problemas estudados, ou seja, a transformação do problema físico em um problema matemático. O problema passa então a ser a determinação de conjuntos. A segunda etapa compreende a proposta de soluções para o problema geométrico. A terceira etapa compreende a utilização, adaptação e proposta de técnicas que permitam a obtenção de resultados das soluções. Muito embora neste trabalho o método seja organizado da representação às técnicas, sua origem está em uma técnica da análise de imagens chamada abertura. A idéia de se utilizar técnicas da análise de imagem para a obtenção das configurações de equilíbrio vem de Delfiner, Étienne e Fonck (1972),

Quenard e Bentz (1992), e do convívio com o desenvolvimento da tese de doutorado de Fernandes (1994) e da dissertação de mestrado de Pieritz (1994).

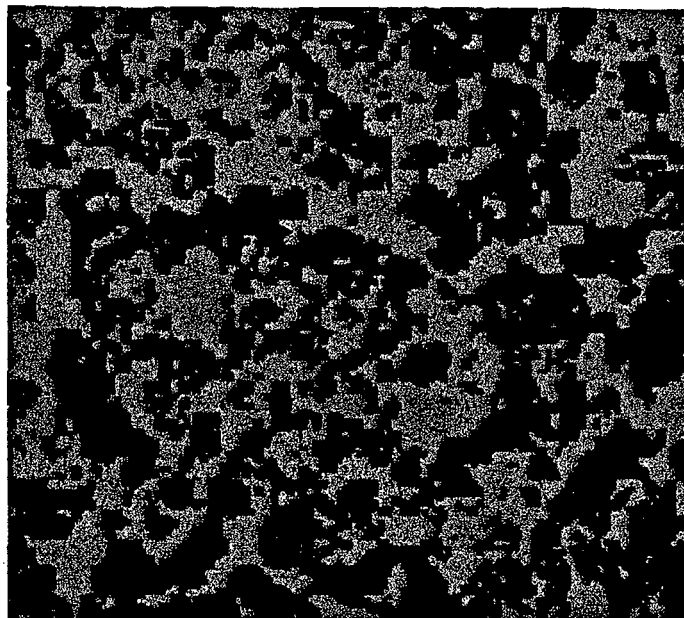


Figura I.1- Representação de uma seção plana de um meio poroso

A figura I.1 representa uma seção plana de um determinado meio poroso. A região preta representa os poros, e a região cinza representa a matriz sólida. Percorrem-se todos os pontos não cinzas P na imagem da figura I.1. Em cada ponto P , centra-se uma bola de raio R_b . Se esta bola possuir intersecção nula com a região de pontos cinzas pinta-se totalmente o interior desta de verde. Se a bola possuir intersecção não nula com a região de pontos cinzas, nada se faz e parte-se para outro ponto P . O resultado desta operação pode também ser obtido utilizando-se a técnica da abertura, da análise de imagens, e é apresentado na figura I.2. Seja a imagem da figura I.1 a representação de um meio poroso no interior de uma câmara com temperatura e umidade relativa controladas e fixas. Este meio poroso está nesta câmara durante um tempo suficiente para que o equilíbrio termodinâmico seja alcançado. Despreza-se a água adsorvida fisicamente na parede. Pela equação de equilíbrio termodinâmico bifásico (Equação de Kelvin) espera-se que a curvatura da interface entre a água condensada nos poros e o ar úmido seja função da umidade relativa e da temperatura e deve ser constante (se os efeitos da gravidade são desprezados). O ângulo de contato formado entre a parede da matriz sólida e a interface entre os dois fluidos deve

ser aproximadamente 0° , Adamson (1982). A figura I.2 apresenta algo parecido com o que se espera do fenômeno de condensação capilar de água se a região cinza é considerada como a matriz sólida, a região cinza claro como o ar e a região preta como a água condensada.

Quenard e Bentz (1992) utilizam esta técnica da análise de imagens, a abertura, para a simulação do fenômeno descrito acima. Delfiner, Étienne e Fonck (1972) propõem que a técnica da abertura possa ser utilizada para a simulação de intrusão de mercúrio. Embora os resultados obtidos sejam parecidos com o esperado, meios porosos reais são tridimensionais, o ângulo de contato para um determinado sistema pode ser distante de 0° , e pode-se pensar em utilizar esta técnica para a simulação de outros processos de equilíbrio bifásicos, como intrusão de mercúrio ou embebição de água, entre outros. Portanto, a técnica da abertura deve ser modificada para englobar estes processos citados acima.

A determinação destas configurações de equilíbrio é feita utilizando-se a técnica da abertura. A partir da obtenção das configurações de equilíbrio pode-se obter diretamente as curvas de pressão capilar para um determinado sistema. Para isto, basta integrar espacialmente a região inclusa entre as paredes da matriz sólida e a interface entre os fluidos. Por exemplo, a integração espacial da região preta na figura I.2 resultaria no conteúdo de água no interior do meio poroso em função daquele determinado raio de curvatura. Assuma-se agora que a técnica proposta neste trabalho é correta e validada. Pode-se então utilizá-la na validação de uma determinada representação de um meio poroso. Uma vez que as curvas de pressão capilar obtidas por esta técnica devem se assemelhar aos dados obtidos experimentalmente. Finalmente a localização das interfaces pode servir como condição de contorno na simulação de fluxos em regime permanente no interior do meio poroso. Desta forma, poder-se-ia obter a permeabilidade relativa do meio poroso em relação a dois fluidos.

A vantagem deste método, em relação a métodos que utilizam redes, é a não necessidade de simplificação da microgeometria, tanto em relação à forma dos objetos como em relação à conectividade. Esta vantagem permite uma análise mais profunda da influência da geometria nos fenômenos. Por outro lado, o método utiliza maior capacidade de computação e depende da obtenção direta da geometria.

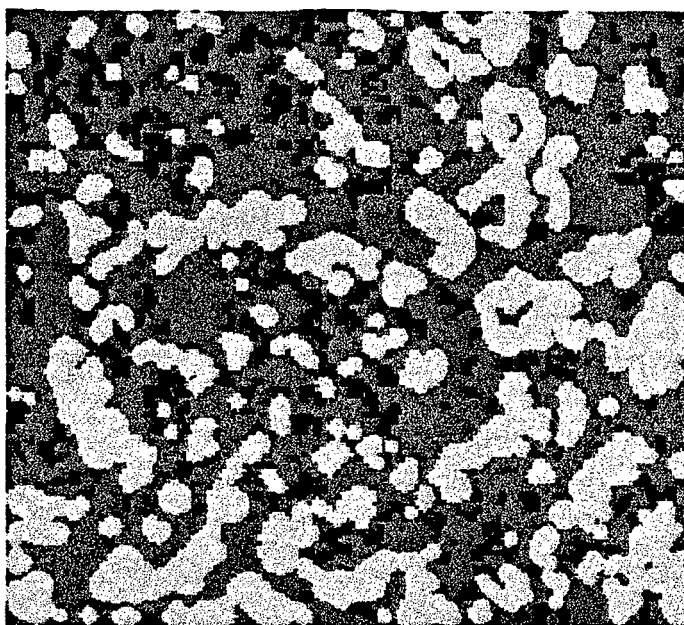


Figura I.2- Resultado da operação de abertura

Em vista dos objetivos ao determinar as configurações de equilíbrio e, para simplificar o trabalho, limitam-se os tipos de sistemas, processos, fluidos e fenômenos estudados. Em relação aos sistemas, estudam-se aqueles que são utilizados em laboratório em experimentos controlados. Estes contêm uma ou mais câmaras, paredes indeformáveis e o meio poroso em questão. Estudam-se apenas meios porosos indeformáveis. Quanto aos fluidos, estudam-se aqueles que podem ser considerados idealmente compressíveis ou idealmente incompressíveis. Considera-se a tensão interfacial a única interação entre os fluidos e a matriz sólida. Estudam-se apenas conjuntos de fluidos imiscíveis e que não mudem de fase. Os processos estudados são entre passos de equilíbrio, bifásicos, primários, quase-estáticos e isotérmicos.

No Capítulo 1, apresentam-se os tipos de processos, fluidos, sistemas e fenômenos estudados. No Capítulo 2, transformam-se as hipóteses e restrições acerca do objeto de estudo em uma série de definições e restrições sobre regiões geométricas. Desta forma, transforma-se um problema físico em um problema geométrico que possui como solução as configurações de equilíbrio. No Capítulo 3, propõe-se uma solução para o problema geométrico e verifica-se a sua correção. No Capítulo 4, apresentam-se as técnicas numéricas que são utilizadas na obtenção dos resultados. No Capítulo 5, apresentam-se os resultados e análises para as simulações efetuadas. No Capítulo 6 apresentam-se as conclusões e as propostas para trabalhos futuros. No apêndice A, apresentam-se os algoritmos das técnicas; e no Apêndice B, apresenta-se o método de

reconstrução de Joshi, que permite gerar um meio poroso tridimensional a partir de imagens planas.

CAPÍTULO 1- PROBLEMA FÍSICO

1.1- INTRODUÇÃO

Como proposto e justificado na introdução, desejam-se determinar as configurações de equilíbrio em processos que ocorrem em meios porosos. No entanto, o interesse reside em apenas alguns tipos de processos em um universo de processos possíveis. Portanto, dedica-se este capítulo a apresentar o objeto de estudo. Ou seja, apresentam-se os tipos de processos e sistemas de interesse e as simplificações que se fazem em relação aos fluidos e aos fenômenos no interior do meio poroso.

Na Seção 1.2, expõem-se os componentes e características que devem possuir os sistemas estudados. Na Seção 1.3, dirige-se a atenção aos tipos de processos considerados. Na Seção 1.4, efetuam-se hipóteses sobre os fluidos envolvidos. Finalmente, na Seção 1.5, apresentam-se as simplificações e hipóteses acerca dos fenômenos que ocorrem no interior do meio poroso.

1.2- SISTEMA

Uma vez que o principal objetivo prático da obtenção das configurações de equilíbrio é o auxílio na obtenção de características do meio poroso, como as curvas de pressão capilar ou a permeabilidade relativa, os sistemas e processos estudados são semelhantes àqueles utilizados em experimentos controlados em laboratório, como um porosímetro a mercúrio ou um sistema de embebição e drenagem de água. Estes sistemas são formados de um meio poroso, uma ou mais câmaras e paredes que envolvem o sistema e separam as câmaras. Por exemplo, temos o sistema da Figura 1.1, que é utilizado para obter dados de intrusão de mercúrio.

Por simplificação, estudam-se apenas os sistemas em que tanto o meio poroso como as paredes podem ser considerados indeformáveis. Isto exclui do estudo sistemas compostos de meios porosos não consolidados, uma vez que, nestes casos, os grãos podem mudar as suas posições relativas em relação aos outros grãos. Com esta simplificação, apenas os fluidos serão deformáveis, o que permite concentrar esforços na obtenção da posição destes.

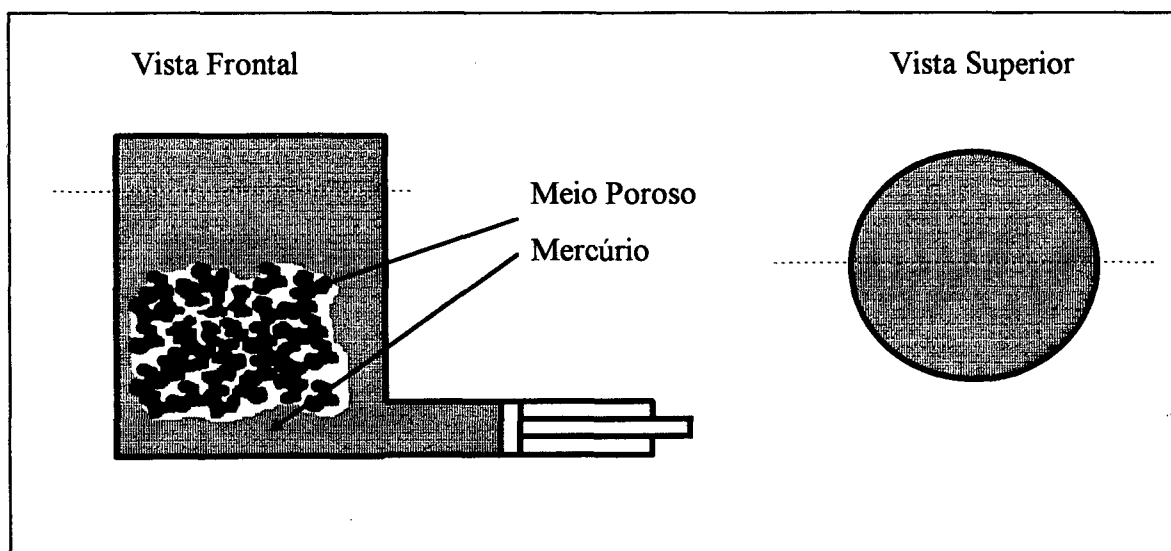


Figura 1.1- Sistema para a obtenção de dados de intrusão de mercúrio.

Empregam-se neste trabalho meios porosos reconstruídos a partir de micrografias de seções polidas. O processo de geração de um meio tridimensional a partir de amostras possui erros e simplificações nas etapas de obtenção da amostra, de obtenção da imagem, de processamento digital da imagem e de reconstrução tridimensional a partir de imagens planas. Mesmo assumindo que não existissem erros nem simplificações neste processo, desde o meio poroso real até chegar

numa estrutura tridimensional digital, existe o problema de que se tem acesso à microestrutura do meio poroso até uma determinada escala, e se esta escala for maior que o livre caminho médio das moléculas dos fluidos, como comumente o é, está se desconsiderando a conectividade nestas escalas menores. Esta limitação pode ser causada pelo instrumento utilizado na obtenção das imagens planas ou pela capacidade de armazenamento e processamento computacional de uma matriz tridimensional reconstruída a partir das imagens planas.

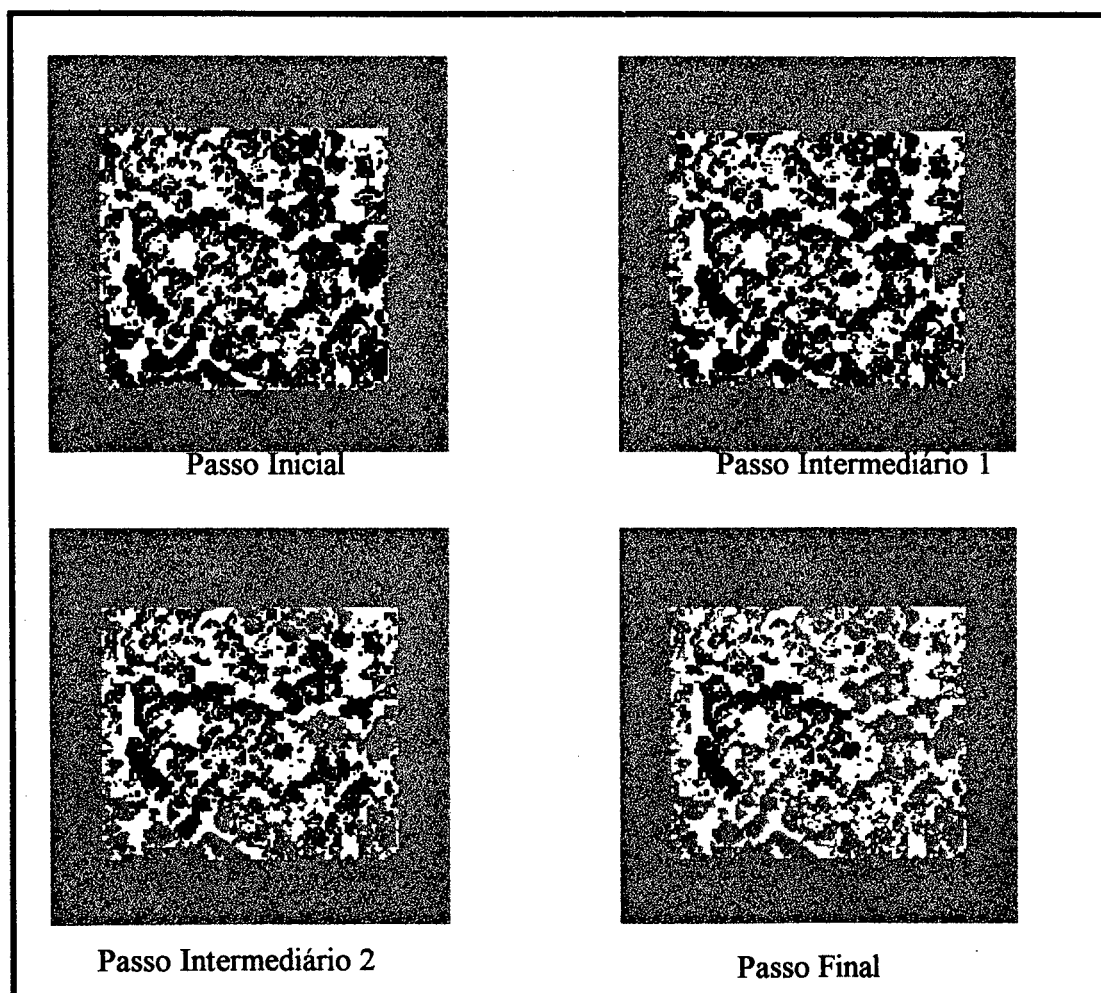


Figura 1.2- Processo de equilíbrio e primário (intrusão de mercúrio). A região branca representa o sólido, a região preta representa os poros preenchidos por vapor de mercúrio e a região cinza representa os poros preenchidos por mercúrio.

Considere na Figura 1.2 que a região branca representa a matriz sólida, a região preta os poros preenchidos com vapor de mercúrio e a região cinza o mercúrio. No passo final do processo da Figura 1.2 existem algumas cavidades que não foram preenchidas pelo mercúrio.

Pode ser que o que se chama de matriz sólida naquele exemplo contenha cavidades não observáveis naquela escala, e então, fatalmente, o mercúrio adentraria aquelas cavidades vazias se a pressão fosse aumentada.

Pode-se contornar o problema no processo da Figura 1.2 apenas simulando o fenômeno até uma pressão tal que o mercúrio possa adentrar apenas as cavidades observáveis. Mas ao se considerar um fluido molhante ao invés de um não-molhante, como num processo de embebição de água, este problema continua existindo, porque a água pode ocupar e mover-se por aqueles possíveis poros não observáveis.

Se o problema for de armazenamento e processamento da matriz tridimensional pode-se utilizar um modelo multiescala. Neste caso, acha-se a solução para cada escala e então compõem-se os resultados para obter um comportamento do meio poroso. Se o problema advier do instrumento utilizado para a obtenção da imagem plana, podem-se utilizar dados de outros experimentos, como adsorção de água, para obter características geométricas destas escalas não observáveis. Fernandes et alii (1994) utilizaram esses dois procedimentos, conjuntamente, para a obtenção de características geométricas de uma argamassa de cal e cimento.

Este trabalho não se ocupa da determinação da geometria do meio poroso e, portanto, apesar dos erros na reconstrução do meio a uma estrutura digital e o fato de se desconhecer escalas inferiores às aquelas observáveis pelo microscópio, assume-se que o meio poroso é deterministicamente conhecido e que os poros menores que a escala observável não existem. Ou ainda, para cada ponto do meio poroso é possível afirmar se este ponto pertence à matriz sólida ou à uma cavidade.

Resumindo, o sistema é formado exclusivamente de uma ou mais câmaras, do meio poroso e de paredes sólidas. Tanto o meio poroso como as paredes são indeformáveis. O meio poroso é deterministicamente conhecido.

1.3- FLUIDOS

Em relação aos fluidos estudados, consideram-se apenas aqueles que possuem determinadas características que simplificam o estudo. Estas características são o tipo de compressibilidade dos fluidos, o fato destes não mudarem de fase e de serem imiscíveis.

Quanto à compressibilidade dos fluidos, consideram-se estes como idealmente compressíveis ou como idealmente incompressíveis. Um fluido é idealmente compressível quando

se pode variar o seu volume sem variar a sua pressão, ou seja, $\frac{\partial p}{\partial V} = 0$. Um exemplo de fluido que pode ser considerado idealmente compressível é o vapor de mercúrio em um processo de intrusão de mercúrio. A pressão deste é desprezável em relação à pressão do mercúrio líquido, portanto, as variações de pressão podem ser desconsideradas. Utiliza-se também, como exemplo, o ar como fluido idealmente compressível. No entanto, este exemplo serve apenas como ilustração de um tipo de processo, uma vez que o ar possui aproximadamente a compressibilidade prevista pela equação dos gases ideais. Considera-se um fluido idealmente incompressível quando se pode variar a sua pressão sem variar o seu volume, ou seja, $\frac{\partial V}{\partial p} = 0$. Nas condições em que os processos estudados se desenvolvem pode-se considerar que todos os fluidos em estado líquido são idealmente incompressíveis.

Seja τ o tempo para que os fluidos atinjam um estado de equilíbrio mecânico. E seja t o tempo necessário para que um dos fluidos mude de fase um volume significativo. Estudam-se conjuntos de fluidos tais que $t/\tau \gg 1$. Ou seja, estudam-se os processos em que o tempo para que os fluidos alcancem o estado de equilíbrio é muito menor que o tempo necessário para que haja evaporação ou condensação. Isto é equivalente a assumir que os fluidos não mudam de fase.

Finalmente, estuda-se um conjunto de fluidos em que o tempo necessário para que se misturem é muito grande em relação ao tempo que o sistema leva para atingir um estado de equilíbrio mecânico. Isto é, os fluidos são imiscíveis.

1.4- PROCESSO

As limitações que se utiliza em relação aos processos estudados visam principalmente restringir os tipos de processos àqueles que interessam nos experimentos que se buscam simular.

A primeira limitação quanto aos processos é que são considerados apenas aqueles processos em que a pressão de um dos fluidos é igual em todas as câmaras, para um determinado passo do processo. É o caso, por exemplo, da Figura 1.3, em que o ar está presente em duas câmaras. Estuda-se este processo apenas se as pressões do ar nas duas câmaras forem iguais entre si em qualquer passo do processo. Esta restrição não é forte uma vez que os sistemas utilizados nos experimentos possuem, na maioria das vezes, no máximo duas câmaras e cada uma delas é preenchida por um dos fluidos.

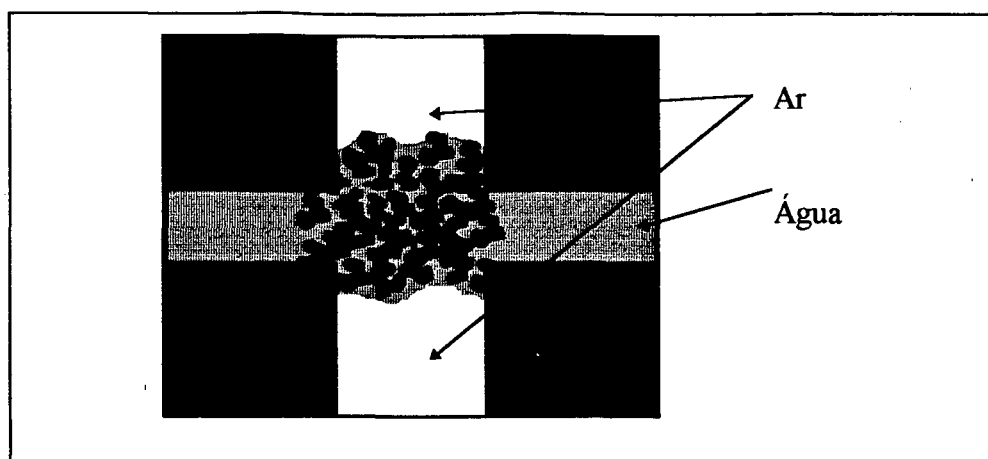


Figura 1.3- Processo em que um dos fluidos está em mais de uma câmara.

Consideram-se apenas processos entre passos de equilíbrio. Um processo entre passos de equilíbrio é aquele em que se ajustam as pressões externas ao meio poroso e se espera que os fluidos encontrem um estado de equilíbrio tanto no interior como no exterior do meio poroso. É o caso, por exemplo, de um processo de intrusão de mercúrio, onde se aumenta a pressão do mercúrio e se espera que o mercúrio penetre em alguns poros do meio e atinja um estado de equilíbrio.

Outra limitação aos tipos de processos estudados é que se estudam, por simplificação, apenas processos que envolvam dois fluidos, ou seja, processos bifásicos.

Desejam-se obter as configurações de equilíbrio para determinados valores de pressão controlados nas câmaras (isto é, para determinados passos do processo). Estas pressões podem possuir valores bastante distantes. Para o modelo utilizado neste trabalho, não importam os fenômenos dinâmicos que ocorrem entre dois passos do processo. No entanto, parece óbvio que estes fenômenos dinâmicos podem modificar as configurações de equilíbrio. Não se pode garantir que um processo de invasão em meios porosos seja quase-estático. Mas pode-se garantir que a variação das pressões controladas nas câmaras seja quase-estática. Portanto, estudam-se processos em que a variação das pressão externa é feita de forma quase-estática, esperando desta forma que os fenômenos dinâmicos sejam minimizados (embora não possam ser anulados).

Para simplificação da análise, consideram-se apenas processos nos quais não haja variação de temperatura espacial ou temporal.

Estudam-se processos nos quais uma vez que um dos fluidos ocupa uma das câmaras no início do processo, este a ocupará até o final. Nem sempre uma câmara é ocupada por apenas um dos fluidos do início ao fim do processo. Por exemplo, o esquema na Figura 1.4, no qual a presença de um canto na fronteira do sistema provoca uma interface entre fluidos na câmara superior. Este fato pode não ser preocupante, uma vez que, nos experimentos, procura-se fugir destas configurações, ou evitando estes cantos ou minimizando estes volumes de fluido exteriores em relação ao volume de fluido interior ao meio poroso.

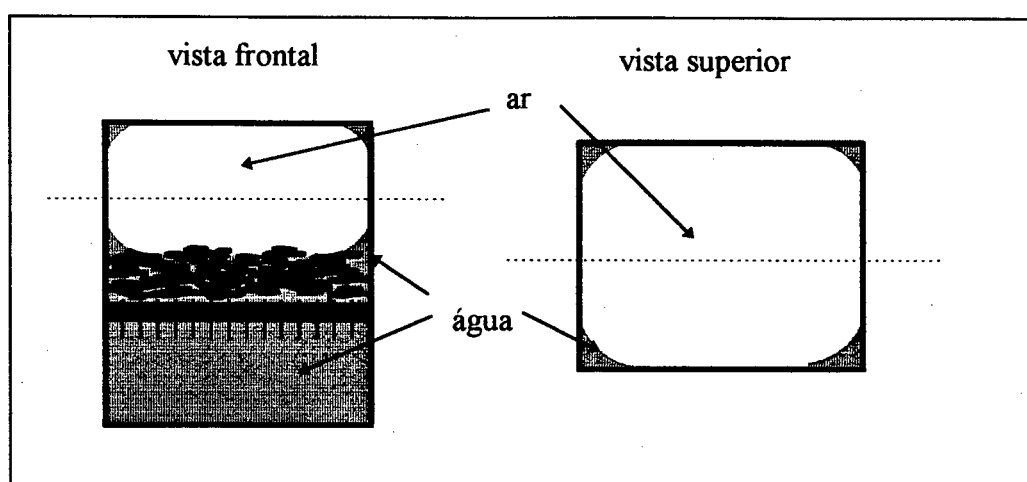


Figura 1.4- Sistema em que existe interface entre fluidos nas câmaras

Também sob pretexto de simplificar o modelo, estudam-se apenas processos primários. Processos primários são aqueles em que, no início do processo, apenas um fluido preenche as cavidades do meio poroso, e que, no decorrer do processo, o outro fluido adentra estas cavidades sem jamais retroceder. A Figura 1.2 apresenta diversos passos de um processo de equilíbrio e primário. Naquele exemplo, a pressão do mercúrio sempre aumenta, de forma que o mercúrio adentra os poros menores. Se a pressão do mercúrio aumentasse e depois diminuísse, poderia ocorrer uma retração do mercúrio, e o processo não seria mais primário.

Neste trabalho, chama-se de processo de invasão um processo em que o fluido que adentra o meio poroso está sempre conectado às câmaras. Quando se faz a hipótese de que o processo é primário e que os fluidos não mudam de fase, o processo resultante é necessariamente de invasão.

1.5- FENÔMENOS

Despreza-se neste trabalho qualquer tipo de interação entre os fluidos e a matriz sólida, como atração ou repulsão molecular, além do fenômeno molecular que provoca a tensão interfacial. Utiliza-se apenas um valor de tensão interfacial para cada superfície possível no sistema trifásico. Isto equivale dizer que o processo é isotérmico (como dito anteriormente) e que a matriz sólida é homogênea.

A ação da gravidade sobre a diferença de pressão dos fluidos na interface pode ser desprezada na maior parte dos problemas se a relação abaixo, Inequação 1.1, for satisfeita, Everett e Haynes (1972). Na Inequação 1.1, ρ_1 e ρ_2 são as massas específicas das duas fases, g é a aceleração da gravidade, Δz é a extensão vertical da interface sob consideração, σ^{12} é a tensão interfacial entre as duas fases e C^{12} é a curvatura da interface.

$$\left| \frac{(\rho_1 - \rho_2) \cdot g \Delta z}{\sigma^{12} C^{12}} \right| \ll 1 \quad (1.1)$$

Despreza-se, neste trabalho, por simplicidade, também a ação da gravidade ao longo do sistema como um todo. Por exemplo, na representação de um sistema na Figura 1.2, considera-se que o mercúrio possui distribuição de pressão uniforme. Resumindo, despreza-se qualquer ação da gravidade sobre o fenômeno. Isto equivale a dizer que a distribuição de pressão em cada porção conexa de um fluido é uniforme.

Desprezando, como se está fazendo, a ação da gravidade sobre as interfaces e interações entre os fluidos e a matriz sólida (como a adsorção de um dos fluidos à parede da matriz sólida), pode-se assumir que a curvatura da interface entre fluidos é dada pela Equação 1.2, Adamson (1982) e Everett e Haynes (1972), que é a equação de equilíbrio bifásico de Young-Laplace. A equação de Young-Laplace diz que a curvatura de uma interface é constante ao longo desta e proporcional à diferença de pressão entre as fases.

$$C^{12} = \frac{P_1 - P_2}{\sigma^{12}} \quad (1.2)$$

$$\theta_{AB} = \arccos((\sigma_{SA} - \sigma_{SB}) / \sigma_{AB}) \quad (1.3)$$

Dado um sistema trifásico (dois fluidos e a matriz sólida), o ângulo de contato formado entre as três interfaces (se a matriz sólida for plana) é dado pela relação acima (Equação 1.3). Esta relação é alcançada quando se assume que o sistema trifásico está em equilíbrio, Adamson (1982). Utiliza-se esta relação neste trabalho mesmo que a parede da matriz sólida não seja plana. Estudam-se apenas os casos em que $\theta_{AB} \neq 90^\circ$, o que equivale a dizer que estudam-se apenas casos em que $\sigma_{SA} \neq \sigma_{SB}$. Não é muito preocupante o fato de se utilizar uma equação desenvolvida para parede plana uma vez que, nas simulações, é utilizado diretamente o valor do ângulo de contato determinado experimentalmente.

Considere-se o sistema da Figura 1.5, que representa uma cavidade cilíndrica de raio R .

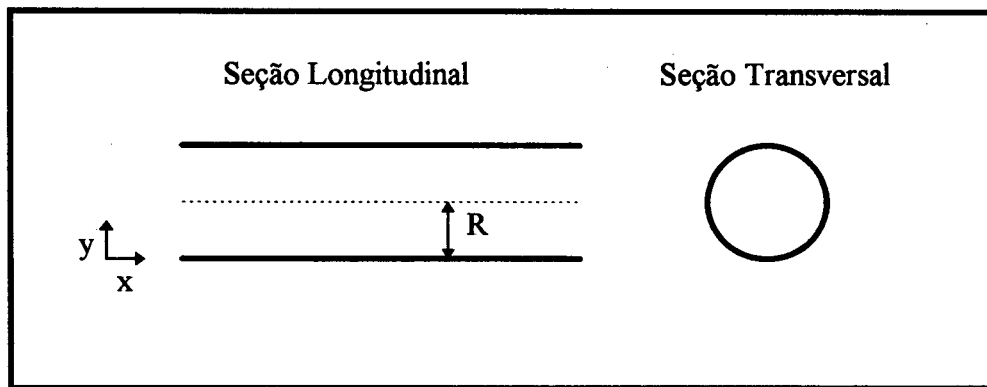


Figura 1.5- Cilindro de Raio R .

Seja θ o ângulo de contato formado no encontro das três fases, medido no interior da fase molhante. Seja $h=y/R$, $z=x/R$. Para simplificação dos termos da solução, faça-se ainda:

$$p_c = - \frac{(p^1 - p^2) \cdot R}{\sigma^{12}} \quad (1.4)$$

onde p_c é a pressão capilar, p^1 e p^2 são as pressões, respectivamente, no fluido molhante e no fluido não-molhante, e σ^{12} a tensão interfacial entre as duas fases.

Espera-se que qualquer interface em equilíbrio existente neste cilindro seja uma superfície de revolução. A equação de Young-Laplace, para uma superfície de revolução, é dada pela equação 1.5, Adamson (1982):

$$p_c = \frac{1}{(1-h)\left(1+\left(\frac{dh}{dz}\right)^2\right)^{1/2}} + \frac{\frac{d^2h}{dz^2}}{\left(1+\left(\frac{dh}{dz}\right)^2\right)^{3/2}} \quad (1.5)$$

A solução da Equação 1.5 é:

$$z = \int_0^h \left\{ \left[\frac{(h-1)}{p_c h \left(\frac{h}{2} - 1\right) + \cos(\theta)} \right]^2 - 1 \right\}^{-1/2} dh \quad (1.6)$$

Para $p_c < 2\cos(\theta)$, a solução é válida para h no intervalo $[0, h_0]$, onde h_0 assume o valor:

$$h_0 = 2 - \frac{2\cos\theta}{p_c} \quad (1.7)$$

Para $p_c \geq 2\cos(\theta)$, a solução é válida para h no intervalo $[0, h_\infty]$, onde h_∞ assume o valor:

$$h_\infty = 1 - \left(1 - \frac{2\cos(\theta)}{p_c}\right)^{1/2} \quad (1.8)$$

Na Figura 1.6, são apresentados dois casos (com $\theta=0$), um com $p_c > 2$ e outro com $p_c < 2$. Naquelas curvas assumiu-se simetria em relação ao eixo z para determinar toda a interface. Pode-se notar que a curva para o caso $p_c > 2$ possui um ponto (ou linha, quando se faz a revolução da curva) onde a curvatura não é definida (isto acontece para qualquer $p_c > 2$), o que não acontece na curva para $p_c < 2$. No entanto, a não ser neste ponto, a curva respeita a equação de Young-Laplace. Segundo Everett e Haynes (19172), uma interface é estável apenas se $\partial V / \partial p_c \leq 0$, o que parece óbvio, pois, quando se aumenta p_c , espera-se que o volume de fluido molhante diminua. Analisando-se a Equação 1.6 para vários valores de p_c , é possível verificar que $\partial V / \partial p_c \leq 0$ se $p_c \geq 2\cos\theta$, e que $\partial V / \partial p_c \geq 0$ se $p_c \leq 2\cos\theta$. Portanto a solução da equação de Young-Laplace resulta em uma interface estável, mas que possui um ponto em que a curvatura não é definida para $p_c \geq 2\cos\theta$ e em uma interface instável se $p_c \leq 2\cos\theta$. Além do fato de se esperar que o fluido molhante, para $p_c \leq 2\cos\theta$, preencha todo o cilindro, e que existam apenas interfaces nas extremidades do cilindro, Everett e Haynes (1972), Gauglitz e Radke (1988) e Tsakiroglou e

Payatakes (1990) utilizam a solução da Equação 1.6 para $p_c \leq 2 \cos \theta$, o que nos parece bastante estranho, uma vez que estas interfaces não são estáveis. Portanto este fenômeno necessita de mais estudos, tanto matemáticos na análise do ponto em que a solução não possui curvatura definida, como físicos, introduzindo os efeitos de adsorção pela parede e efeitos de gravidade. É possível que estes efeitos, embora aparentemente desprezáveis em determinadas configurações, possam retirar o ponto de indefinição da curvatura nas interfaces.

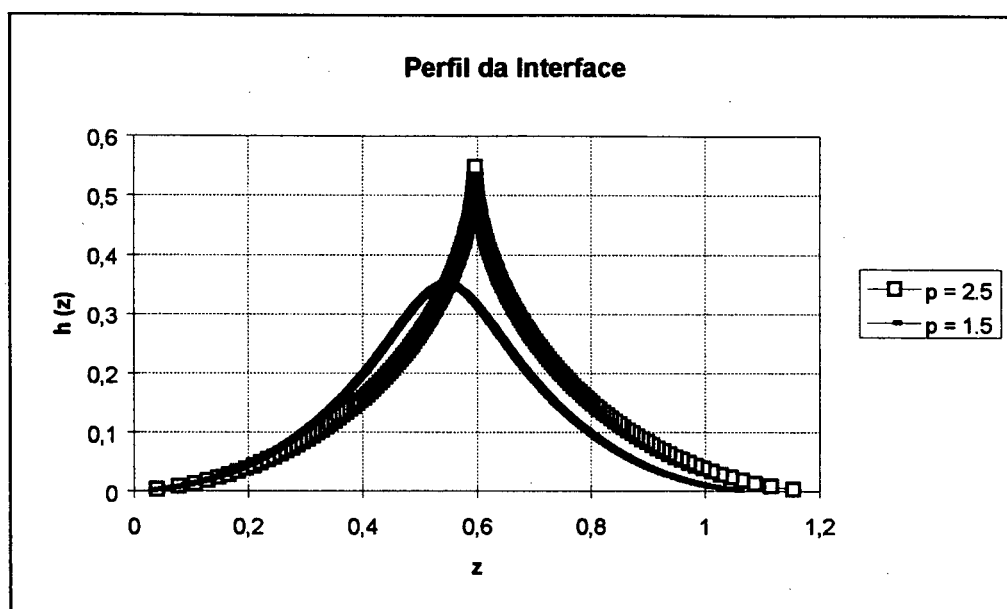


Figura 1.6- Perfil da interface no interior de um cilindro obtida pela solução da equação de Young-Laplace para superfícies de revolução

Assume-se, neste trabalho, que as interfaces de equilíbrio são esféricas e que estas podem apresentar linhas de curvatura não definida, como na Figura 1.7, onde o preto representa o fluido molhante, o cinza o fluido não-molhante, e o branco representa a matriz sólida. Os círculos cinza escuro salientam os pontos onde a curvatura não é definida. Esta hipótese, bastante forte, é tomada não pelos resultados obtidos na solução da equação de Young-Laplace (exposto acima) para superfícies de revolução, mas pela forma das interfaces resultantes das técnicas utilizadas neste trabalho, muito embora a solução da equação de Young-Laplace (que carece de maiores estudos) apresente um indício de que estas interfaces possam não estar muito distantes da realidade.

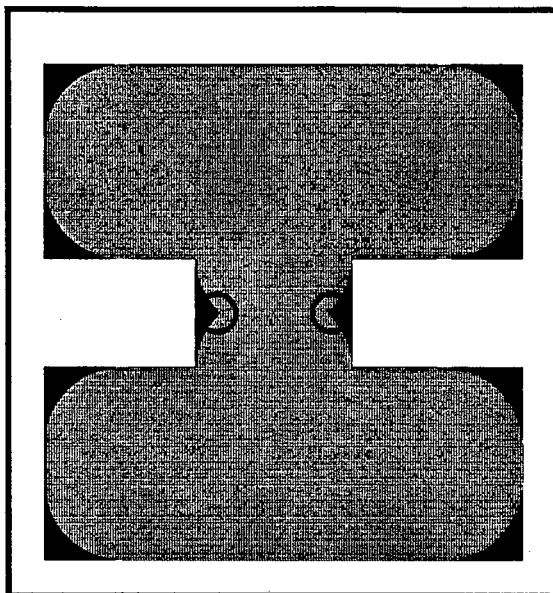


Figura 1.7- Caso em que a interface possui curvatura não definida em um ponto (ou linha).

Quando se assume interface esférica, como se faz neste trabalho, a questão da interface ser ou não estável passa a ser desprezável. Isto porque uma interface esférica, que respeita a equação de equilíbrio trifásico (ângulo de contato) só pode ser instável em cavidades alongadas formadas pela translação de figuras planas (como cilindros ou paralelepípedos), como na Figura 1.8. Em outros casos, só existe uma interface possível que esteja em equilíbrio, e, portanto, esta é necessariamente estável, como no exemplo da Figura 1.9.

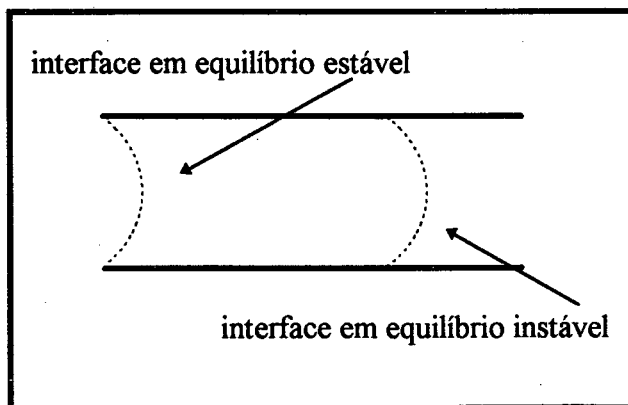


Figura 1.8- Tipo de cavidade onde são possíveis várias interfaces em equilíbrio

Cavidades de translação perfeitas (sem rugosidade nenhuma) não ocorrem em meios porosos reais. Além disto, estas interfaces estão em equilíbrio mecânico apenas para um valor específico de p_c . Então, torna-se desnecessária a investigação da estabilidade de uma determinada interface em equilíbrio. Portanto, assume-se que qualquer configuração de equilíbrio determinada é estável.

Estudam-se processos entre passos de equilíbrio, e utilizam-se equações de equilíbrio na tentativa de determinar as configurações. No entanto, estas configurações são decorrentes de fenômenos dinâmicos e, embora a simulação de processos em que a pressão externa possua variação quase-estática possa diminuir a contribuição destes fenômenos dinâmicos, estes não podem ser anulados. Veja por exemplo o processo representado na Figura 1.10.

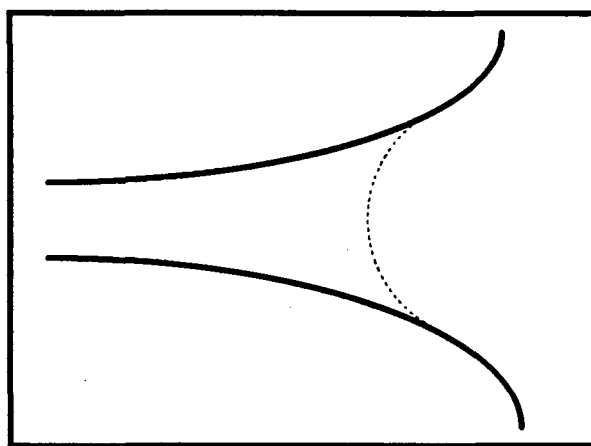


Figura 1.9- Tipo de cavidade onde apenas uma interface está em equilíbrio

Diga-se que o diagrama 1.10(a) representa uma determinada configuração de equilíbrio para dadas pressões dos fluidos incompressíveis A (cinza claro), molhante, e B (cinza escuro), não-molhante. Aumenta-se agora a pressão do fluido A de forma que a curvatura da interface seja maior que a largura das cavidades (representadas pelos maiores retângulos). Quando se considera que o tempo de deslocamento da interface depende apenas da forma do objeto, alcança-se a configuração de equilíbrio representada no diagrama 1.10(b). Quando se considera que a evolução das configurações de equilíbrio é instantânea, alcança-se a configuração representada pelo diagrama 1.10(c). Pode-se notar que as configurações alcançadas são diferentes. Para determinar qual é realmente a configuração alcançada no sistema físico, seria que resolver um problema de mecânica dos fluidos com deslocamento de interface para cada geometria dos meios porosos estudados.

problema de mecânica dos fluidos com deslocamento de interface para cada geometria dos meios porosos estudados.

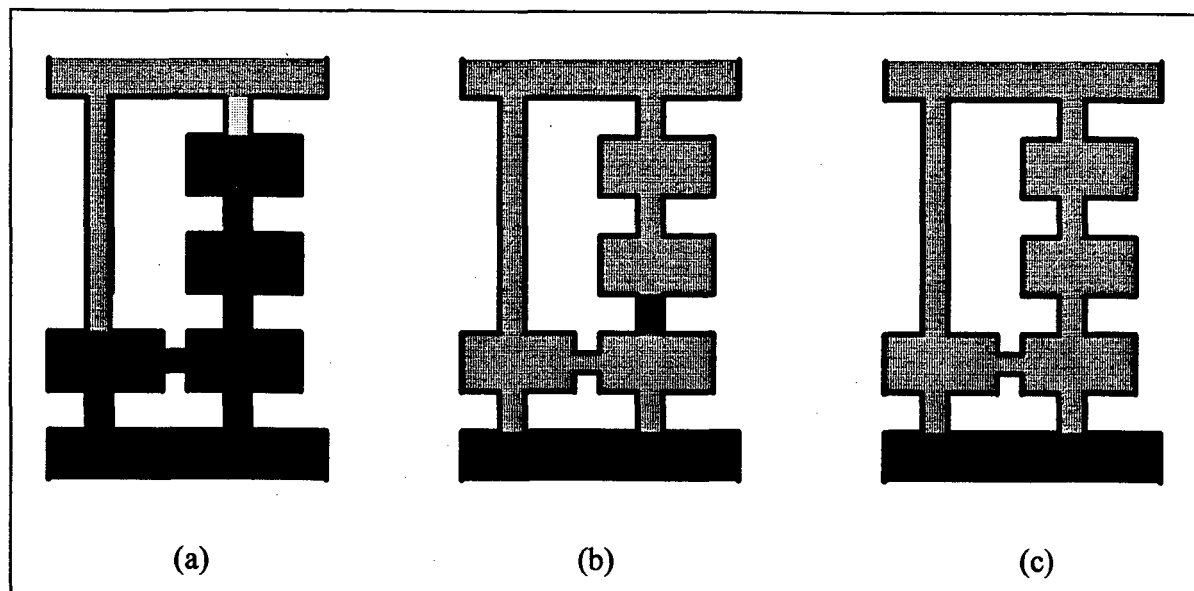


Figura 1.10- Possíveis caminhos para alcançar uma configuração de equilíbrio

Deve ficar claro que se utiliza neste exemplo um passo de pressão e uma geometria tais que favorecem a visualização do problema. A utilização de passos de pressão menores e a pseudo-aleatoriedade da microgeometria dos meios porosos reais tendem a diminuir o problema. Neste trabalho, assume-se que as configurações de equilíbrio são alcançadas instantaneamente (como no diagrama 1.10(c)).

A Figura 1.11 representa uma cavidade na qual o fluido B (não molhante) adentra. Assume-se que a curvatura, para as pressões p_B e p_A , seja a curvatura das interfaces desenhadas com linha contínua. Qualquer configuração desenhada por linha contínua é uma configuração de equilíbrio. No entanto, para que o fluido B alcance as configurações à direita do afunilamento da cavidade, seria necessário passar por configurações com curvatura maior que a curvatura dada pela equação de Young-Laplace, como por exemplo a configuração desenhada com linha tracejada.

Admite-se por exemplo, que as pressões p_A e p_B no exterior da cavidade sejam fixas. Pela equação de Young-Laplace, para que a interface desenhada por linha tracejada seja possível, ou a pressão local (na interface) p'_B aumenta, ou p'_A diminui. Caso isto ocorra, em qualquer dos dois casos, forma-se um gradiente de pressão no interior de uma das fases, e conseqüentemente, o

Então, imaginando que a interface em movimento continua respeitando a equação de equilíbrio bifásico e trifásico, as configurações à direita do afunilamento são resultantes de um processo dinâmico “impossível”.

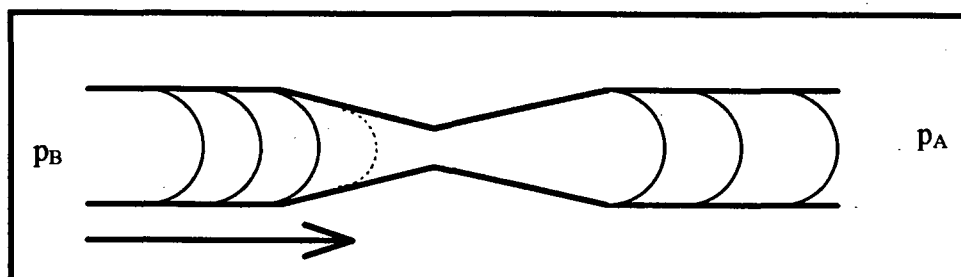


Figura 1.11 - Configurações de Equilíbrio para o Caso de um Fluido Não Molhante Adentrando uma Cavidade

Utilizando a mesma análise no sistema representado na Figura 1.12, que representa um fluido molhante adentrando a cavidade, as configurações de equilíbrio à esquerda do alargamento da cavidade são resultantes de um processo dinâmico “impossível”.

Define-se pseudo-interface uma superfície qualquer que respeite o ângulo de contato dado pela equação de equilíbrio trifásico. Exemplos de pseudo-interfaces são todas as interfaces propostas nas Figuras 1.11 e 1.12 (com linha contínua ou tracejada).

Para evitar que estas configurações “impossíveis” ocorram, assume-se que o espaço ocupado pelo fluido que adentra o meio poroso não deve conter nenhuma pseudo-interface com curvatura superior àquela dada pela equação de Young-Laplace (para as pressões envolvidas), se o fluido que adentra for não molhante. Assume-se também que o espaço ocupado pelo fluido que adentra o meio poroso não deve conter nenhuma pseudo-interface com curvatura inferior àquela dada pela equação de Young-Laplace, quando o fluido que adentra o meio poroso é o fluido molhante.

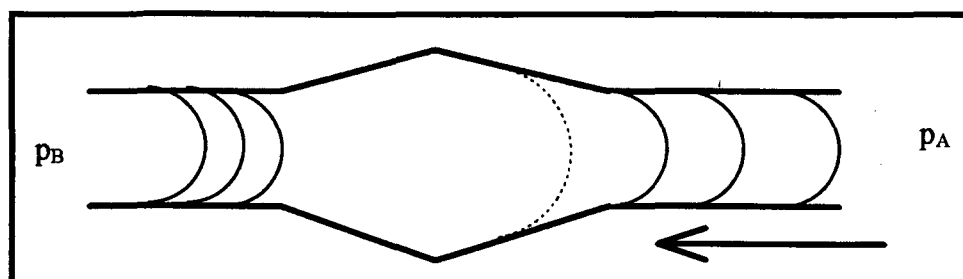


Figura 1.12 - Configurações de Equilíbrio para o Caso de um Fluido Molhante Adentrando uma Cavidade

No Capítulo 2, todas as simplificações e hipóteses adotadas neste capítulo são discutidas de forma que a representação geométrica do problema de determinação das configurações de equilíbrio possua, pelo menos aparentemente, as mesmas características assumidas em relação ao fenômeno físico real.

CAPÍTULO 2 - REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA

2.1- INTRODUÇÃO

No capítulo anterior, foram apresentadas as restrições e simplificações acerca dos processos físicos estudados. Neste capítulo, são definidas regiões geométricas na esperança de que suas características sejam similares às características do sistema físico que buscam representar.

A definição destas regiões geométricas tem a dupla função de, por um lado, representar o problema físico real e, por outro lado, restringir os dados e a solução do problema geométrico. Ou seja, é uma passagem do problema físico a uma solução de um problema geométrico o qual se julga possuir qualitativa e quantitativamente o mesmo comportamento do sistema físico simplificado no capítulo anterior.

Na primeira parte da representação geométrica são reconhecidas, basicamente, partes do sistema interessantes para a determinação das configurações de equilíbrio, como, por exemplo, as

cavidades e a matriz sólida do meio poroso. Então são definidas regiões¹ geométricas que representam estas partes.

Após definidas as regiões que representam as partes indeformáveis do sistema, são definidas as regiões que representam os fluidos.

A determinação da localização destas regiões é equivalente à determinação das configurações de equilíbrio. Ou seja, estas regiões são a própria solução do problema geométrico. Estas regiões devem respeitar certas restrições. Por exemplo, a região que representa um determinado fluido deve possuir interface com o outro fluido com curvatura constante, a fim de representar uma configuração de equilíbrio prevista pela equação de Young-Laplace.

Esta atividade de representação geométrica é conduzida de forma a se chegar, no final deste capítulo, com um problema geométrico enunciado, para o qual se buscam soluções, que nada mais são que as configurações de equilíbrio.

Resumindo, este capítulo é dedicado a definições. Não poderia ser de outra forma, uma vez que a passagem de um sistema físico a uma representação matemática não é guiada por nenhum método ou técnica a não ser o “bom senso”, muito embora este “bom senso” possa ser em muitos casos, por insistência, confundido com técnica ou método.

A ausência da ação da gravidade, a impossibilidade de mudança de fase, a inexistência de gradientes espaciais ou temporais de temperatura e a impossibilidade de um estado de equilíbrio instável são simplesmente omitidas da representação geométrica, e, desta forma, garante-se que não ocorram no fenômeno simulado.

As hipóteses de que o processo é quase-estático e de que a evolução entre passos de equilíbrio é instantânea também não são representadas geometricamente, uma vez que tratam, de certa forma, dos fenômenos dinâmicos que ocorrem entre os passos de equilíbrio. Porém estas hipóteses devem ser, na medida do possível, satisfeitas pelo sistema físico de forma a aproximar a solução proposta e a realidade.

Procura-se fazer com que as demais hipóteses sobre o sistema físico, formuladas no Capítulo 1, sejam respeitadas por meio de restrições impostas às regiões definidas.

¹Neste trabalho é usado o termo região significando região não necessariamente conexa. Isto é, uma região formada de um ou mais “pedaços”.

A representação geométrica é desenvolvida conforme a estrutura descrita a seguir. Na Seção 2.2, são definidas as regiões que representam as partes indeformáveis do sistema. Na Seção 2.3, são definidas as regiões que representam os fluidos, e restrições à estas, de forma a obter destas um comportamento similar ao comportamento dos fenômenos estudados. Finalmente, na Seção 2.4, é enunciado o problema geométrico para o qual é desejada uma solução.

2.2- REGIÕES INDEFORMÁVEIS

Nesta seção, são definidas as regiões indeformáveis, ou seja, regiões que representam componentes do sistema que não mudam de forma durante todo o processo. O termo indeformável é utilizado para classificar as regiões pelo que representam. As regiões que representam os fluidos em um determinado estado de equilíbrio também não mudam de forma, no entanto representam os fluidos, que fisicamente mudam de forma.

No capítulo anterior, foi dito que o sistema físico estudado é formado exclusivamente de uma ou mais câmaras, do meio poroso e de paredes sólidas, e que tanto o meio poroso como as paredes são considerados indeformáveis, sendo que o meio poroso é considerado como deterministicamente conhecido.

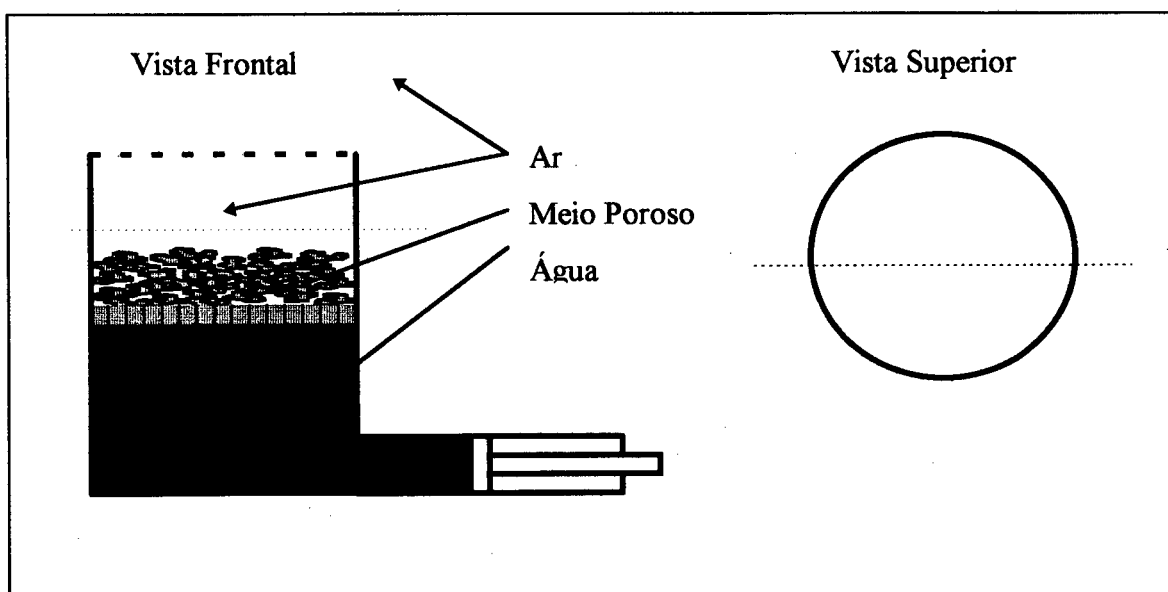


Figura 2.1 - Sistema de drenagem de água

Define-se a região universo, U , como uma sub-região do espaço discreto tridimensional (Z^3) ou do espaço euclidiano tridimensional (R^3). A primeira região indeformável a ser considerada é

aquela que representa o domínio espacial do fenômeno. Considere-se, por exemplo, a Figura 2.1 como o esquema de um sistema que serve à obtenção de dados de drenagem de água. Assume-se que, em um determinado passo do processo, tanto o ar como a água estejam em repouso, ou, como se estudam fenômenos em que a ação da gravidade pode ser desprezada, que tanto o ar como a água possuem distribuição de pressão uniforme. Pode-se, então, considerar que apenas a região no interior da linha preta (contínua e tracejada) influencia as configurações de equilíbrio no interior do meio poroso. Portanto esta região pode ser considerada como o sistema propriamente dito. Uma vez que se conhece a pressão dos fluidos nas câmaras, é possível representar as fronteiras deste sistema com paredes indeformáveis, sem prejuízo ao tratamento do fenômeno no interior do meio poroso. Esta região, que representa o sistema, é chamada de região universo ou U. Generalizando, U representa a parte do sistema físico que influencia as configurações de equilíbrio no interior do meio poroso.

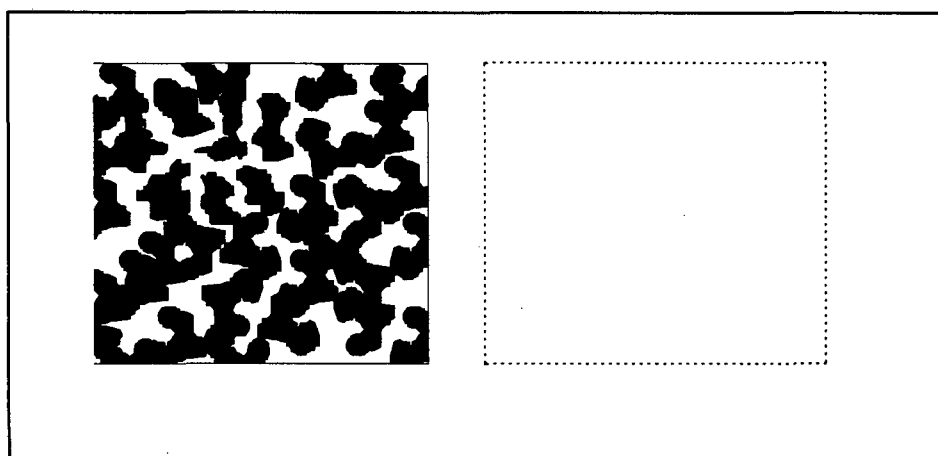


Figura 2.2 - Região Meio Poroso utilizando uma região simples

Definem-se a seguir as regiões L e M, complementares em relação a U. De volta à Figura 2.1, é possível reconhecer facilmente mais duas partes deste sistema: o meio poroso, que é representado pela região M, e as câmaras que o envolvem incluindo as paredes, que são representadas pela região meio livre ou L. A região L representa a parte do sistema em que o fluido se apresenta em estado livre. Em outras palavras, não existem interfaces entre fluidos na parte representada pela região L. A região M representa, obviamente, os poros e a matriz sólida do meio poroso.

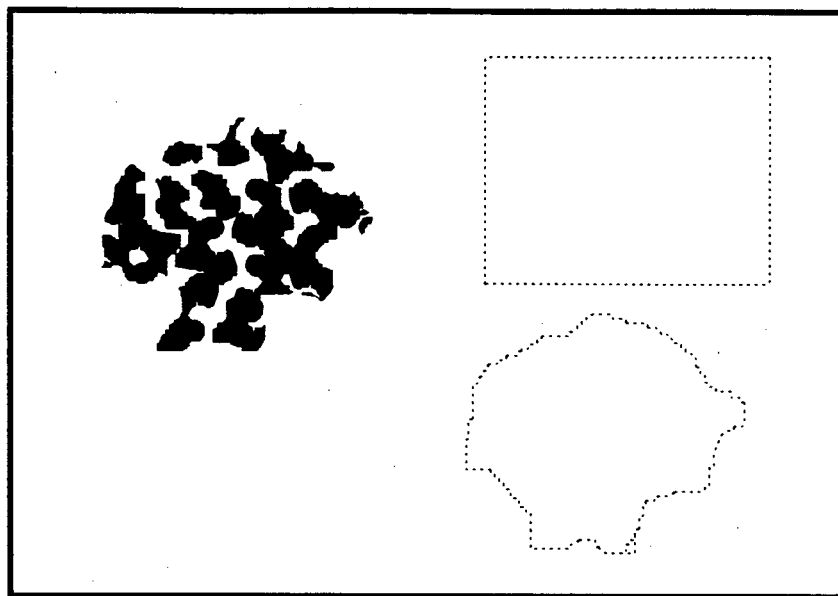


Figura 2.3 - Região Meio Poroso utilizando região simples e configuração inicial

A definição da região meio poroso deveria ser feita pelas configurações de equilíbrio, e não por meio de formas geométricas simples, como cubos ou esferas. No caso da Figura 2.2, a escolha da região meio poroso como um cubo parece bastante adequada. Isto já não ocorre no caso da Figura 2.3. No caso geral, é mais adequado definir a região meio poroso para um determinado sistema conhecendo-se as configurações inicial e final do sistema.

No entanto, como será visto no capítulo seguinte, a solução das configurações de equilíbrio tem como dado de entrada indireto a região meio poroso. O que se faz então, na prática, é definir uma região meio poroso utilizando uma forma geométrica simples, que se pode assumir com segurança, que contenha a região meio poroso definida através das configurações. Desta forma se pode, pela solução das configurações, obter a região M. Se o interesse for apenas na obtenção de resultados integrais, como a saturação por exemplo, pode-se apenas corrigir os volumes dos fluidos no interior do meio poroso subtraindo a diferença entre a região M definida por uma forma geométrica simples e a região M obtida por meio das configurações.

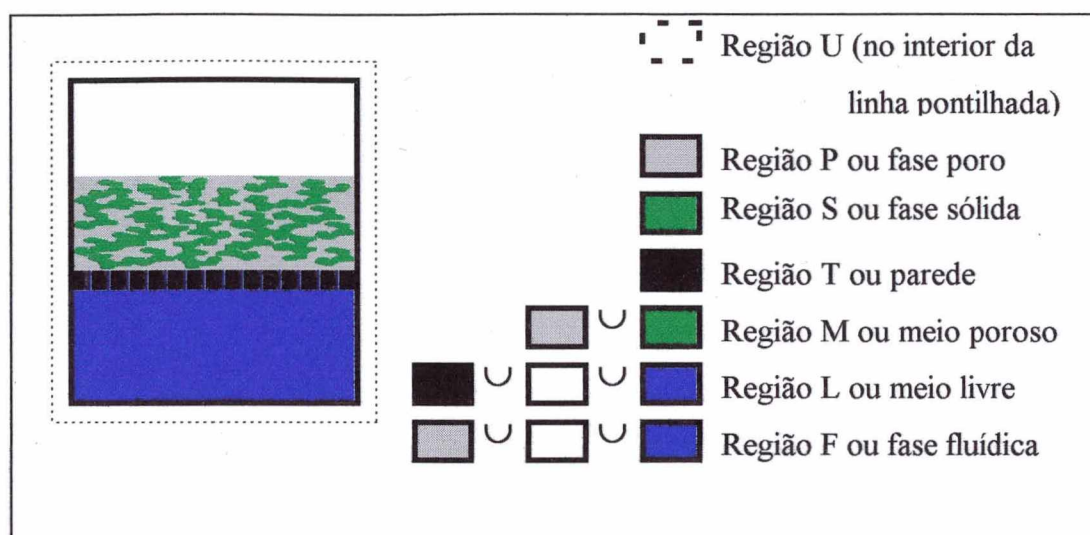


Figura 2.4- Representação geométrica do sistema de drenagem de água

Uma vez que as regiões L e M representam partes do sistema com características conflitantes, ou seja, em um caso, não existe interface entre fluidos e, no outro caso, a região é a própria região onde estas interfaces podem ocorrer, pode-se então definir as duas como regiões complementares sem perda de generalização quanto a qualquer processo aqui estudado. Além disto, as duas regiões formam a parte do sistema que influencia as configurações de equilíbrio, ou seja, formam a região universo, U.

Define-se T como uma região contida em L e que contém a fronteira de U. A parte representada pela região meio livre, L, é dividida em duas partes: uma, onde os fluidos estão livres, e outra, as paredes. Tanto as paredes que formam a fronteira da região universo como as paredes internas são representadas pela região T, ou região parede. Como no exemplo da figura 2.1, pode-se incluir uma parede indeformável na fronteira da região universo, em qualquer sistema físico, mesmo que esta não exista. Isto porque as distribuições de pressão nas câmaras são consideradas uniformes e conhecidas, e porque se assume que a região meio livre não possui interfaces entre fluidos. Resumindo, T é uma região contida em L que contém a fronteira da região U. Esta imposição, de T conter a fronteira de U, é feita pensando na técnica utilizada para a obtenção de resultados.

Definem-se S e P como regiões complementares em relação a M. A região fase poro, ou P, representa os poros. A região fase sólida, ou S, representa a matriz sólida.

Define-se $F = (L - T) \cup P$. Finalmente, pode-se reconhecer uma parte bem clara no sistema, que é a parte que contém os fluidos e que é representada pela região fase fluida ou F. Embora os

fluidos mudem de posição durante o processo, a parte representada pela região fase fluidica é indeformável, desde que as paredes e a matriz sólida também sejam. As partes do sistema que contêm os fluidos são as câmaras (menos as paredes) e os poros do meio poroso.

Se, de volta à Figura 2.1, reconhece-se cada um dos componentes que podem ser representados pelas regiões indeformáveis introduzidas nesta seção, obtém-se como resultado da representação geométrica do esquema da Figura 2.1, o esquema apresentado na Figura 2.4.

2.3- REGIÕES FLUÍDICAS

Considere-se um processo bifásico, envolvendo dois fluidos A e B. Sejam as regiões A^i , ou região fluido A no passo i (que representa a localização do fluido A no passo i do processo), e B^i , ou região fluido B no passo i (que representa a localização do fluido B no passo i do processo). Deve ficar claro que o termo fluido A ou fluido B é utilizado para denominar o fluido real no interior de um sistema físico. Já o termo região fluido A ou B no passo i é utilizado para denominar uma representação geométrica da localização do fluido em um determinado passo i do processo.

Estas regiões, A^i e B^i , são chamadas de regiões fluídicas por causa do componente do sistema físico que representam, os fluidos. Estas regiões não mudam de forma.

Para que estas regiões representem adequadamente as configurações de equilíbrio em cada um dos passos do processo, torna-se necessária a imposição de restrições e atribuição de propriedades a estas. O restante desta seção é dedicado a isto.

Definem-se as regiões A^i e B^i como complementares em relação à F. A região F representa a parte do sistema onde se localizam os fluidos A e B, portanto A^i e B^i estão contidas em F. Os fluidos representados são imiscíveis e, portanto, um ponto do sistema está contido exclusivamente no espaço ocupado pelo fluido A ou pelo fluido B. Logo as regiões A^i e B^i são complementares em relação à F.

O fluido B deve ser conectado às câmaras. Já o fluido A pode vir a se desconectar das câmaras durante o processo. Para representar esta desconectividade, a região A^i é dividida em sub-regiões fluídicas dominadas A_j^i . A sub-região A_0^i representa as partes do fluido A que possuem conectividade com as câmaras no passo i. As sub-regiões $A_{j \neq 0}^i$ representam componentes conexos de A^i que não possuem conectividade com as câmaras no passo i. Como a região A_0^i representa as porções que possuem conectividade com as câmaras, e $A_{j \neq 0}^i$ representa as

componentes conexas que não possuem conectividade é óbvio que estas regiões são complementares em relação à A^i . A Figura 2.5 apresenta um exemplo onde podem ser reconhecidas as regiões fluídicas.

A seguir, definem-se formalmente as sub-regiões fluídicas A_j^i . Por definição, a sub-região A_0^i é o conjunto de todos os pontos x pertencentes à A^i tais que existe uma linha contínua t contida em A^i que una x a algum ponto y pertencente à região $(A^i \cap L)$. Por definição, a região $A_{j \neq 0}^i$ é o conjunto de todos os pontos x pertencentes à A^i tais que não existe uma linha contínua t contida em A^i que una x a qualquer ponto y pertencente à região $\bigcup_{k=0}^{j-1} A_k^i$ e tais que existe uma linha contínua t' contida em $A_{j \neq 0}^i$ que una quaisquer dois pontos x e x' pertencentes à $A_{j \neq 0}^i$. Nota-se aqui, que a determinação das sub-regiões fluídicas é feita de forma recursiva, ou seja, determina-se A_0^i , depois A_1^i e assim por diante. Define-se $n(i)$ como o número de componentes conexas da região A não conectados ao meio livre no passo i .

Até o momento foram apenas definidas as regiões que representam os fluidos. Agora é necessária a imposição de restrições a estas regiões, de maneira que estas possuam a mesma forma dos fluidos os quais representam, em um dado processo.

Restringe-se B^i de tal forma que qualquer ponto x pertencente à B^i possa ser conectado a algum ponto y pertencente à região $(B^i \cap L)$ por uma linha t contida em B^i . O processo estudado é de invasão e sem mudança de fase, portanto é óbvio que o fluido B no interior do meio poroso deve ser conectado à porção do fluido B nas câmaras.

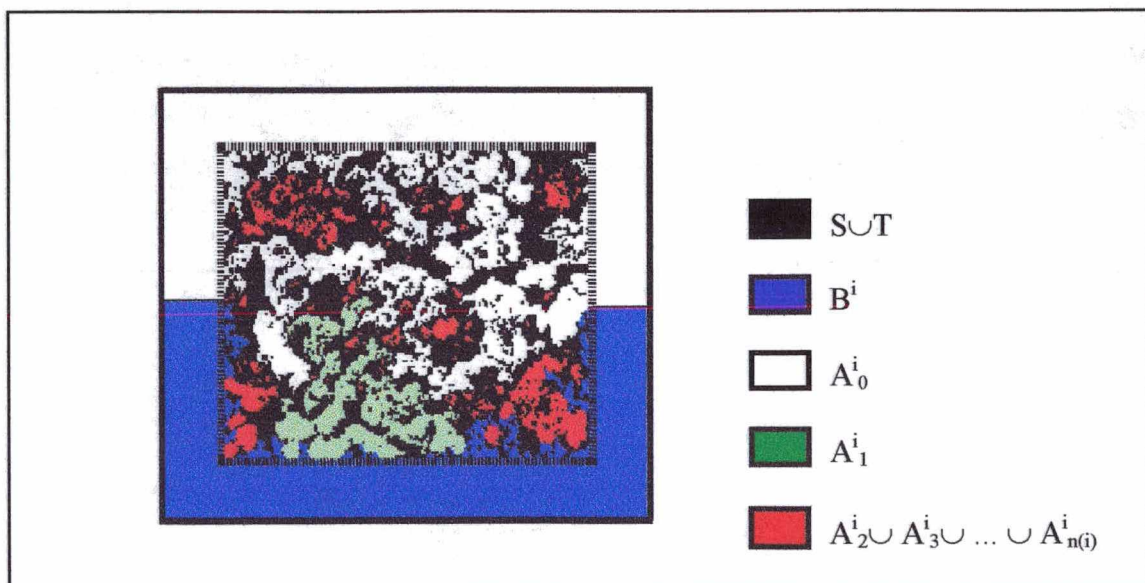


Figura 2.5- Regiões Fluídicas

Como dito no Capítulo 1, se um fluido ocupa uma das câmaras no início do processo, este deve ocupá-la em todos os passos do processo. Portanto restringem-se as regiões fluidicas de forma que $(A^i \cap L) = (A^j \cap L)$ e $(B^i \cap L) = (B^j \cap L)$.

Limita-se a análise a processos de invasão primários cuja representação geométrica satisfaça $A^0 \supset P$ e $B^i \subset B^{i+1}$. Um processo é primário quando no início deste apenas um dos fluidos preenche as cavidades do meio poroso e que no decorrer do processo o outro fluido adentra o meio poroso sem jamais retroceder. A região A^0 representa o espaço ocupado pelo fluido que no início do processo preenche as cavidades do meio poroso. As regiões B^i representam os espaços ocupados pelo fluido que adentra as cavidades do meio poroso no decorrer do processo.

Na Seção 2.2 foi dito que a região L , ou meio livre, representa uma parte do sistema em que não existem interfaces entre os fluidos (em nenhum passo do processo). Ou seja, não deve haver contato entre o fluido A e o fluido B no interior das câmaras. Portanto, restringe-se A^i e B^i de maneira que qualquer ponto x pertencente à $(B^i \cap L)$ não possa ser conectado à qualquer ponto y pertencente à $(A^i \cap L)$ por uma linha t contida em $(L - T)$.

Em relação às propriedades dos fluidos apresentadas no capítulo anterior, a compressibilidade e a tensão interfacial, o que se faz neste capítulo é apenas uma transposição destas do sistema físico às regiões que representam os fluidos.

Define-se c_A como uma propriedade das regiões A^i , que assume valor 0 ou 1.

Uma vez que o processo é primário e de invasão, a compressibilidade do fluido B (que é o fluido que adentra o meio poroso) não influi sobre as condições de equilíbrio alcançadas. Portanto basta representar a compressibilidade dos fluidos como uma propriedade do fluido A . Diz-se que A é idealmente compressível quando c_A assume valor 1, e diz-se que A é idealmente incompressível quando c_A assume valor 0. Utilizam-se os valores 0 e 1 para esta propriedade a fim de se considerar ou desprezar termos em algumas equações posteriores.

Definem-se σ_{SA} , σ_{SB} e σ_{AB} , que assumem valores sempre positivos, como propriedade do sistema. Pelo justificado no capítulo anterior, estudam-se apenas os casos em que $\sigma_{SA} \neq \sigma_{SB}$. Estas propriedades do sistema representam as tensões interfaciais existentes nas interfaces entre os fluidos e a matriz sólida. Fisicamente, as tensões interfaciais são propriedades das interfaces. Considera-se apenas o caso em que $\sigma_{SA} \neq \sigma_{SB}$, uma vez que, nos processos estudados, o ângulo de contato das interfaces entre os fluidos e a matriz sólida deve ser diferente de 90° .

Por definição, o ângulo de contato, θ_{AB} , formado entre as interfaces das regiões A/B , S/B e S/A assume o valor $\theta_{AB} = \arccos((\sigma_{SA} - \sigma_{SB}) / \sigma_{AB})$ (medido no interior da região A). A equação

de equilíbrio trifásico desenvolvida para parede plana diz que o ângulo de contato formado entre as interfaces representadas pelas interfaces das regiões A-B, S-B e S-A deve ser sempre o mesmo, independentemente das pressões e do processo. A equação utilizada para a definição do ângulo de contato na representação geométrica é apenas uma transposição da equação de equilíbrio trifásico desenvolvida para parede plana. Pode ser visto o ângulo de contato, no exemplo da Figura 2.6.

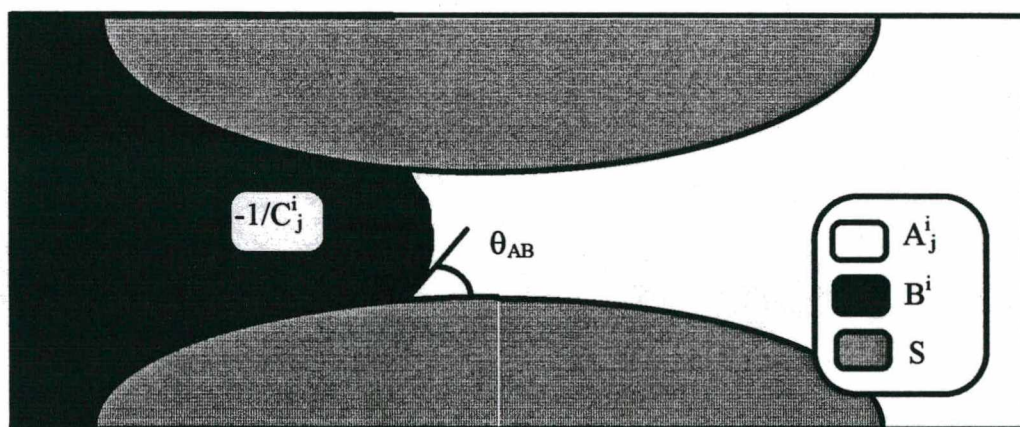


Figura 2.6- Visualização do Ângulo de Contato

Por definição, p_B^i é uma propriedade da região B^i . Como o processo é primário e de invasão, qualquer porção do fluido B está necessariamente conectada às câmaras. Como a distribuição de pressão é uniforme em cada porção contínua dos fluidos e a pressão de um fluido é igual em todas as câmaras para um determinado passo do processo, pode-se concluir que o fluido B possui apenas um valor de pressão em qualquer ponto do espaço por ele ocupado em um determinado passo do processo. Esta pressão é transposta à representação geométrica na forma de uma propriedade da região B^i . p_B^i é chamada de pressão externa (pois é a pressão imposta nas câmaras, na parte externa do meio poroso) da região B no passo i.

Por definição, p_{A0}^i é uma propriedade da região A_0^i . O fluido A pode ter porções conectadas e não conectadas às câmaras. A parte do fluido A (no passo i) conectada às câmaras (representada pela região A_0^i) possui uma distribuição de pressão uniforme, que assume o valor da pressão imposta nas câmaras. Esta pressão é transposta à representação geométrica na forma de uma propriedade da região A_0^i . p_{A0}^i é chamada de pressão externa da região A no passo i.

Por definição, $p_{A_{j \neq 0}}^i$ é uma propriedade da região $A_{j \neq 0}^i$. As pressões das porções do fluido A não conectadas às câmaras dependem do processo. Portanto não são dados do problema. Estas

pressões são transpostas à representação geométrica como propriedades das regiões $A_{j \neq 0}^i$. A pressão $p_{A_{j \neq 0}}^i$ é chamada genericamente de pressão interna da região A.

Seja I_j^i a interface entre as regiões A_j^i e B^i . Seja C_j^i a curvatura desta interface. Para que as regiões representem de forma adequada o sistema físico simplificado do capítulo anterior, restringe-se a forma de I_j^i à forma esférica e faz-se $C_j^i = (p_{A_j}^i - p_B^i)/\sigma_{AB}$. Sendo que, se C_j^i for positivo, o raio de curvatura repousa na região A_j^i . Aqui se fez a transposição da equação de Young-Laplace para a representação geométrica. Nesta transposição, utilizam-se as pressões definidas como propriedades das regiões fluídicas. No exemplo da Figura 2.6, pode-se visualizar a curvatura da interface.

Como não se conhece o processo anterior ao passo inicial, representam-se apenas aqueles processos em que o fluido A possui distribuição de pressão uniforme no passo inicial. Para assegurar que o processo representado seja primário, e para simplificar a solução, restringem-se os tipos de processos estudados àqueles em que a pressão externa do fluido A permanece fixa e em que a pressão externa do fluido B não diminui de valor durante todo o processo. Portanto, restringe-se as pressões de forma que $p_{A_{j \neq 0}}^0 = p_{A_0}^0$, $p_B^i \geq p_B^{i-1}$ e $p_{A_0}^i = p_{A_0}^0$.

As pressões iniciais (p_B^0 e $p_{A_j}^0$) e as pressões externas não iniciais ($p_B^{i \neq 0}$ e $p_{A_0}^{i \neq 0}$) são controladas nos experimentos, e, portanto, são dados do problema geométrico. As pressões internas não iniciais ($p_{A_{j \neq 0}}^{i \neq 0}$) são conseqüentes do processo, e portanto devem ser determinadas.

Se $c_A = 1$ (idealmente compressível), uma vez que uma porção do fluido A desconecta-se das câmaras, a pressão nesta porção permanece fixa, já que, em fluidos idealmente compressíveis, não se pode modificar a pressão alterando o volume. Se $c_A = 0$ (idealmente incompressível), uma vez que uma porção do fluido A desconecta-se das câmaras, a forma, e conseqüentemente a curvatura, desta permanece fixa, já que em fluidos idealmente incompressíveis não se pode modificar o volume alterando a pressão. Torna-se necessário, então, uma determinação das pressões internas no decorrer do processo de forma que estas respeitem as duas restrições impostas acima.

Seja $k(i,j) = \min(m)$, para $i \neq 0$ e $j \neq 0$, onde m é o conjunto de valores no intervalo $[0, n(i)]$ que satisfazem $A_j^i \subset A_m^q$ para qualquer valor de q no intervalo $[0, i-1]$. Seja $z(i,j) = \max(p)$, onde p é o conjunto de valores no intervalo $[0, i-1]$ que satisfazem $A_j^i \subset A_{k(i,j)}^p$.

Assume-se que, para o passo i do processo, as pressões internas assumem o valor $p_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = p_{Ak(i,j)}^{z(i,j)} + (1 - c_A) \cdot (p_B^i - p_{Bj}^{z(i,j)})$. Conseqüentemente, se $c_A = 1$ então $p_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = p_{Ak(i,j)}^{z(i,j)}$, e se $c_A = 0$ então $C_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = C_{k(i,j)}^{z(i,j)}$.

Analisa-se agora o que representam os valores de $k(i,j)$ e $z(i,j)$.

Pela definição de $k(i,j)$, pode-se observar que $k(i,j)=0$ se o espaço ocupado por A_j^i foi ocupado por alguma A_0^k em algum passo k anterior ao passo i . Se $k(i,j)=0$, $z(i,j)$ assume como valor o último passo em que o espaço ocupado por A_j^i foi ocupado por uma região A_0^k conectada às câmaras. Fisicamente, $z(i,j)$ representa o passo em que a porção representada por A_j^i se desconectou das câmaras. Portanto, se $k(i,j)=0$ e se $c_A = 1$, então $p_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = p_{A0}^{z(i,j)} = p_{A0}^0$. Se $c_A = 0$, então $C_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = C_0^{z(i,j)}$.

Analisa-se agora o caso em que $k(i,j) \neq 0$. Seja $a_{z1}=i$ e $a_{k1}=j$. Seja $a_{z(s>1)} = z(a_{z(s-1)}, a_{k(s-1)})$ e $a_{k(s>1)} = k(a_{z(s-1)}, a_{k(s-1)})$. Seja w tal que $a_{w(w)} = 0$. Pode ser visto que $p_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = p_{Aak(w)}^0 + (1 - c_A) \cdot (p_B^i - p_B^0)$. Portanto, se $c_A = 1$, então $p_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = p_{Aak(w)}^0 = p_{A0}^0$, e se $c_A = 0$ então $C_{Aj \neq 0}^{i \neq 0} = C_{ak(w)}^0$ (que é a curvatura daquela porção no passo inicial).

Como visto no capítulo anterior, uma interface está em equilíbrio mecânico se respeita as equações de equilíbrio bifásico (Equação 1.2) e trifásico (Equação 1.3). A equação de equilíbrio bifásico diz que a interface deve possuir uma curvatura constante com valor proporcional à diferença das pressões das fases, e assume-se que a interface é esférica. A equação de equilíbrio trifásico diz que um determinado ângulo de contato deve existir entre as três interfaces, e este valor é invariante quanto às pressões das fases. Se o ângulo de contato medido no interior da fase A é menor que 90° , o raio de curvatura deve repousar no interior da fase B (para que a interface exista). Se for maior que 90° , o raio de curvatura deve repousar no interior da fase A (para que a interface exista). Logo, para que o processo representado seja um processo de equilíbrio, se $(\theta_{AB} - 90^\circ) > 0$, p_{Aj}^i deve ser maior que p_B^i , e se $(\theta_{AB} - 90^\circ) < 0$, p_{Aj}^i deve ser menor que p_B^i . Quando $(\theta_{AB} - 90^\circ) > 0$ e $p_{A0}^i = p_{A0}^0 > p_B^i$. Como visto acima, $p_{Ak(i,j)}^{z(i,j)} = p_{A0}^0$. Como $z(i,j) < i$ então $p_B^i > p_{Bj}^{z(i,j)}$. Portanto $p_{Aj}^i \geq p_{A0}^0$. Então $p_{Aj}^i > p_B^i$. Quando $(\theta_{AB} - 90^\circ) < 0$, $p_{A0}^i = p_{A0}^0 < p_B^i$ e $p_{A0}^{z(i,j)} = p_{A0}^0 < p_{Bj}^{z(i,j)}$. Se $c_A = 1$ então $p_{Aj}^i = p_{A0}^0$ e portanto $p_{Aj}^i < p_B^i$. Se $c_A = 0$, $p_{Aj}^i = p_B^i - (p_{Bj}^{z(i,j)} - p_{A0}^0)$. Então $p_{Aj}^i < p_B^i$. Portanto para que o processo representado seja um processo de equilíbrio restringe-se as pressões externas de forma que $(p_{A0}^i - p_B^i) \cdot (\theta_{AB} - 90^\circ) > 0$.

Seja $\Gamma_{B/B}^i$ uma superfície contida na região B^i , com curvatura constante e ângulo formado entre esta e a região S com valor θ_{AB} . Esta superfície é chamada de pseudo-interface. Por

definição, B^i deve ser tal a não possuir qualquer pseudo-interface, no interior de P , com o módulo da curvatura superior à $|C_0^i|$ se $\theta_{AB} < \pi/2$ ou inferior à $|C_0^i|$ se $\theta_{AB} > \pi/2$. Isto é feito, como justificado no capítulo anterior, na tentativa de se evitar que as configurações de equilíbrio sejam resultantes de fenômenos dinâmicos fisicamente improváveis.

2.4- O PROBLEMA EM SUA REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA

Resumindo todas as definições deste capítulo pode-se então enunciar o problema geométrico que representa o problema físico da seguinte forma:

Sendo dados (que respeitam as definições):

- Regiões U , L , T e S .
- A compressibilidade c_A da região A e as tensões interfaciais σ_{AB} , σ_{SA} e σ_{SB}
- Pressões iniciais p_{Aj}^0 e p_{Bi}^0 e pressões externas p_{A0}^i e p_B^i
- Região A^0

Deseja-se obter as regiões A^i e B^i para todos os passos do processo. De tal forma que:

- A curvatura da interface I_j^i entre a região B^i e a sub-região A_j^i seja C_j^i (representação da equação de Young-Laplace).
- A interface I_j^i seja esférica (como assumido aceitável no Capítulo 1).
- A^i e B^i sejam complementares em relação a F (fluidos imiscíveis).
- A^i e B^i sejam tais que qualquer ponto x pertencente à $(B^i \cap L)$ não possa ser conectado a qualquer ponto y pertencente à $(A_0^i \cap L)$ por uma linha t contida em $(L - T)$ (não existam interfaces no interior das câmaras).
- A^i e B^i sejam tais que $(A^i \cap L) = (A^j \cap L)$ e $(B^i \cap L) = (B^j \cap L)$ (uma vez que um dos fluidos ocupa uma das câmaras no início do processo, este a ocupa até o final).
- B^i seja tal que $B^i \subset B^{i+1}$ (processo primário).
- B^i seja tal que qualquer ponto x pertencente à B^i possa ser conectado a algum ponto y pertencente à região $(B^i \cap L)$ por uma linha t contida em B^i (processo de invasão).
- O ângulo de contato, θ_{AB} , formado entre as interfaces das regiões A/B , S/B e S/A assumo o valor $\theta_{AB} = \arccos((\sigma_{SA} - \sigma_{SB}) / \sigma_{AB})$ (representação da equação de equilíbrio trifásico)

• B^i seja tal a não possuir qualquer pseudo-interface, no interior de P , com o módulo da curvatura superior à $|C_0^i|$ se $(\theta_{AB} < \pi/2)$ ou inferior à $|C_0^i|$ se $(\theta_{AB} > \pi/2)$ (previsão contra configurações de equilíbrio resultantes de processos dinâmicos “impossíveis”).

No capítulo seguinte, os dados são organizados juntamente com as suas respectivas condições. É proposta uma solução para o problema geométrico aqui enunciado. Então verifica-se se esta satisfaz cada uma de suas restrições.

CAPÍTULO 3 - SOLUÇÃO PROPOSTA

3.1- INTRODUÇÃO

No Capítulo 1, foram apresentados os tipos de processos e fenômenos que são considerados neste trabalho. No Capítulo 2, foram então apresentadas condições para as regiões com o objetivo de que a representação geométrica possuísse as mesmas características do problema físico.

Neste capítulo, procura-se um conjunto de regiões geométricas e propriedades que satisfaçam todas as condições do capítulo anterior. E que portanto possuam, aparentemente, qualitativa e quantitativamente, o mesmo comportamento das configurações de equilíbrio do sistema físico.

Algumas condições do capítulo anterior dizem respeito parcial ou totalmente aos dados do problema, e, portanto, na Seção 3.2, são reapresentados os dados do problema de forma que respeitem suas respectivas condições. O restante das condições deve ser respeitado pela solução proposta (A^i e B^i). Na Seção 3.3, são definidas algumas regiões auxiliares utilizadas como termos

na solução proposta. Na Seção 3.4, apresenta-se a solução proposta, por meio de um processo intuitivo para dar à solução as características desejadas. Na Seção 3.5, a solução proposta é verificada. Considera-se que a solução é verificada quando respeita as condições da representação geométrica, a menos de alguns erros desprezáveis e aceitáveis. Na Seção 3.6, comenta-se resumidamente a verificação da solução proposta. Finalmente, na Seção 3.7, são expostos alguns exemplos de processos com a suas respectivas soluções. Os exemplos utilizados neste capítulo são bidimensionais para facilitar a visualização, no entanto a solução é válida tanto para o espaço bidimensional como para o tridimensional, uma vez que as interfaces são assumidas esféricas.

3.2- DADOS

Uma parte das condições do capítulo anterior diz respeito aos dados do problema geométrico. Nesta seção, estes dados do problema são reapresentados com as suas respectivas restrições. Desta forma, o procedimento de obtenção das configurações é simplificado, e várias condições são satisfeitas apenas com a escolha correta dos dados.

São dados do problema as regiões U (região universo), L (região meio livre), T (região parede) e S (região fase sólida), a compressibilidade c_A da região A, as tensões interfaciais σ_{AB} , σ_{SA} e σ_{SB} , as pressões iniciais $p_{A_j}^0$ e p_B^0 , as pressões externas p_{A0}^i e p_B^i e a região A^0 (configuração inicial).

Com estas regiões, que são dados diretos do problema, e utilizando as condições, outras regiões podem ser obtidas a fim de simplificar a expressão da solução. A maneira de se obter estas outras regiões, que são dados indiretos, é revista no final desta seção.

Com as regiões U, L, T e S, o sistema é completamente representado, com as suas câmaras, paredes, o meio poroso com a matriz sólida e as suas cavidades, e a parte do sistema reservada aos fluidos.

- A única restrição sobre a região universo, ou U, é que U deve ser uma região do espaço discreto Z^3 ou do espaço euclidiano R^3 .
- A região L, ou região meio livre (que representa as câmaras e as paredes do sistema), deve estar contida em U.
- A região T, ou região parede, deve estar contida em e conter a fronteira da região U.

- A região S, ou região fase sólida, deve estar contida em $(U-L=M)$.

A compressibilidade da região A e as tensões interfaciais especificam os fluidos envolvidos no processo e o material da matriz sólida. Muito embora a matriz sólida e os fluidos possuam muitas outras propriedades, apenas estas influem no fenômeno estudado utilizando o método apresentado neste trabalho.

- Se a região A representa um fluido idealmente compressível, então $c_A=1$. Se A representa um fluido idealmente incompressível, então $c_A=0$.
- Os valores de σ_{AB} , σ_{SA} e σ_{SB} assumem valores positivos, e $\sigma_{SA} \neq \sigma_{SB}$.

As pressões iniciais caracterizam o estado inicial do sistema, e as pressões externas caracterizam o processo.

- As pressões internas iniciais $p_{Aj \neq 0}^0$ e as pressões externas p_{A0}^i da região A, em qualquer passo do processo, assumem o mesmo valor da pressão inicial externa p_{A0}^0 . Se a região A^0 não existe (no início do processo não existe uma porção de A conectada às câmaras), é simplesmente atribuído um valor para p_{A0}^0 .
- As pressões externas da região B devem satisfazer a relação $(p_B^i \geq p_B^{i-1})$.
- As pressões externas de A e B devem satisfazer a relação $(p_{A0}^i - p_B^i) \cdot (\theta_{AB} - 90^\circ) > 0$.

A região A^0 representa a configuração inicial do fluido A, e conseqüentemente do fluido B. E, portanto, com A^0 tem-se a configuração inicial do processo.

- A^0 deve ser uma região contida em $(U-T-S=F)$.
- Não devem existir interfaces entre a região A^0 e $(U-T-S-A^0=B^0)$ na região $(L-T)$ (câmaras).
- A^0 deve conter a região $(U-L-S=P)$.

Como dito no capítulo anterior, utiliza-se na prática uma região M que não necessariamente é dada pelas configurações de equilíbrio. Portanto, as regiões A^0 e B^0 não são necessariamente configurações de equilíbrio que satisfazem os enunciados. Se o desejo é determinar as

configurações de equilíbrio reais para as pressões externas iniciais basta fazer as pressões externas do passo 1 iguais às pressões externas do passo 0.

A partir das regiões e propriedades reapresentadas, pode-se obter as regiões M (região meio poroso), P (região fase poro), F (região fase fluídica) e B^0 (região fluido B) e o ângulo de contato θ_{AB} que simplificam a expressão da solução.

- A região M pode ser obtida a partir de U e L.
- A região P pode ser obtida a partir de M e S.
- A região F pode ser obtida a partir de L, T e P.
- A região B^0 pode ser obtida a partir de A^0 e F.
- O ângulo de contato θ_{AB} pode ser obtido através de σ_{AB} , σ_{SA} e σ_{SB} .

3.3- REGIÕES AUXILIARES

Nesta seção, apresenta-se uma série de regiões auxiliares que são compostas para formar a expressão da solução proposta. Na apresentação destas regiões auxiliares, são introduzidas algumas características das regiões que formam a solução.

Define-se E_x^i como uma bola de raio r^i centrada no ponto $x \in F$, onde $r^i = |2/(C_0^i)|$, no caso tridimensional, e $r^i = |1/(C_0^i)|$, no caso bidimensional. Então E_x^i é uma bola que possui a mesma curvatura que deveriam possuir as interfaces entre as regiões A_0^i e B^i se existir A_0^i . Se não existe A_0^i , não existe A_0^k para nenhum passo k do processo. Se não existe A_0^i e $c_A=1$ (A é idealmente compressível), então a curvatura de E_x^i é a curvatura de todas as interfaces entre A_j^i e B^i pois $p_{A0}^i = p_{Aj}^0 = p_{A0}^0$. E se não existe A_0^i e $c_A=0$, então a solução é $A^i = A^0$ (pois o fluido é incompressível e por mais que seja aumentada a pressão de B^i , o fluido A não pode se deslocar para as câmaras).

Define-se $\theta = \min(180^\circ - \theta_{AB}, \theta_{AB})$, onde θ é o ângulo de contato formado entre as três interfaces do sistema (medido em relação ao fluido de menor pressão)

Define-se $d_x = \text{dist}(x, U-F)$ a menor distância entre um ponto $x \in F$ e a região $(U-F)$. Ou seja, é a menor distância entre um ponto de um dos fluidos à região sólida do sistema.

Define-se E_x^{*i} como a parte da bola E_x^i contida em F se $d_x > r^i \cdot \cos\theta$. Ou é uma região vazia se $d_x \leq r^i \cdot \cos\theta$, ou seja:

$$E_x^{*i} = E_x^i \cap F \quad \text{se } d_x > r^i \cdot \cos\theta \quad (3.1)$$

$$E_x^{*i} = \emptyset \quad \text{se } d_x \leq r^i \cdot \cos\theta. \quad (3.2)$$

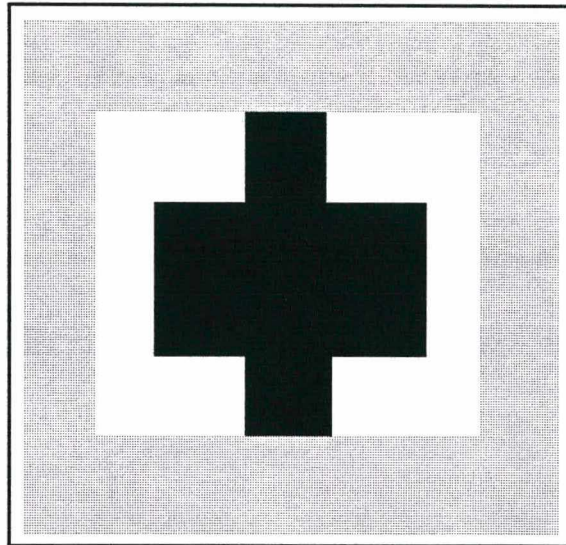


Figura 3.1 - Exemplo de um sistema. A região cinza representa a câmara, a região preta representa o poro e a região branca representa o sólido.

Se agora se faz a união de todas as regiões E_x^{*i} , obtém-se uma região cujas interfaces possuem a curvatura de E_x^i e o ângulo de contato aproximadamente θ .

Este procedimento só é válido se a espessura de qualquer parte da matriz sólida for maior que $r^{\text{máx}} (1 - \cos\theta)$, onde $r^{\text{máx}}$ é o maior raio alcançado em um determinado processo, e se as câmaras possuírem uma certa dimensão mínima, como será visto na Seção 3.5.

Um exemplo de sistema pode ser observado na Figura 3.1, onde o branco representa as partes sólidas do sistema, o cinza representa as câmaras, e o preto representa a fase poro. Um exemplo da união de todas as regiões E_x^{*i} e $\theta = 0^\circ$ para o sistema da Figura 3.1 pode ser visto na

Figura 3.2 (região cinza claro). Neste caso r^i é menor que o tamanho das duas gargantas, e, conseqüentemente, da câmara.

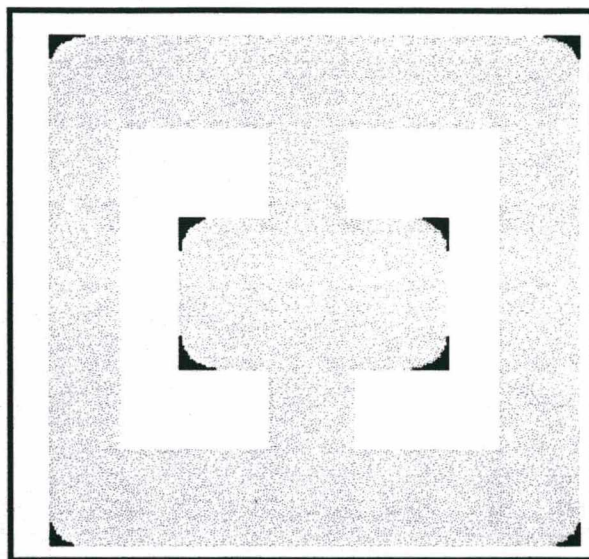


Figura 3.2 - União das regiões E_x^{*i} para o sistema da Figura 3.1. A região cinza representa a união das regiões E_x^{*i} , a região branca representa o sólido.

Define-se $G^i = (F-P) \cup (\cup_x E_x^{*i})$.

Uma vez que não devem existir interfaces entre a região B^i e A^i nas câmaras, faz-se a união da região $(F-P)$ (câmaras) com a união das regiões E_x^{*i} . O resultado desta operação é chamado de região G^i ou região verde do passo i . A região verde para o sistema da Figura 3.1 pode ser observada na Figura 3.3 (região cinza claro). Neste exemplo, pode ser imaginado que a região verde é o mercúrio que adentrou uma cavidade.

O resultado da região verde é utilizado na composição de regiões que resultam na região B^i . Se o ângulo de contato θ_{AB} for menor que 90° , a curvatura da interface deve repousar na região B . O raio de curvatura da região verde G^i repousa em seu interior.

Define-se $\underline{G}^i = (F-G^i)$.

Se θ_{AB} for maior que 90° , a curvatura da interface deve repousar na região A e, portanto, é conveniente definir uma região complementar à G^i , de forma que a sua interface ainda possua a curvatura desejada mas com o raio de curvatura repousando em seu exterior. Esta região é chamada de região \underline{G}^i ou região verde complementar do passo i . A região verde complementar para o sistema da Figura 3.1 é representada pela cor preta na Figura 3.3.

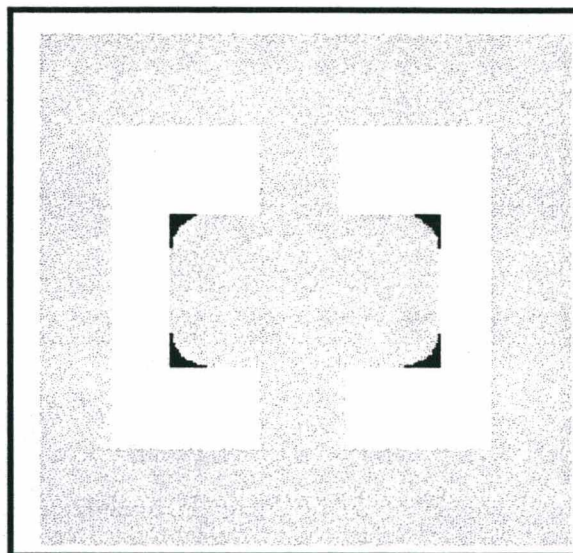


Figura 3.3 - Região G^i para o sistema da Figura 3.1

Define-se $Y^i = (A^{i-1} - A^{i-1}_0) \cup Y^{i-1}$. Sendo que $Y^0 = \emptyset$.

Se o fluido A é incompressível ($c_A = 0$), uma vez que uma porção deste é desconectada das câmaras, esta porção não muda mais de forma. Para que a solução do problema também possua esta característica, é utilizada na composição da expressão de B^i o termo Y^i , chamada de região amarela, que é a união de todas as regiões que se separaram desde o início do processo até o passo $i-1$ e portanto não mudam mais de forma.

Como qualquer ponto de B^i deve poder ser conectado a algum ponto de B^i no interior das câmaras, interessam apenas as componentes conexas da região verde ou verde complementar ou ainda uma composição destas que possuam intersecção não nula com $(B^i \cap L)$. Sabe-se que $(B^i \cap L) = (B^0 \cap L)$, e, portanto, interessam então apenas as componentes conexas de G^i ou \underline{G}^i ou ainda uma composição destas que possuam intersecção não nula com B^0 .

O símbolo $(X|_0)$ significa a união de todas as componentes conexas de uma certa região X que possui intersecção não nula com B^0 .

Na Figura 3.4 é visto um exemplo de várias regiões auxiliares para um determinado sistema.

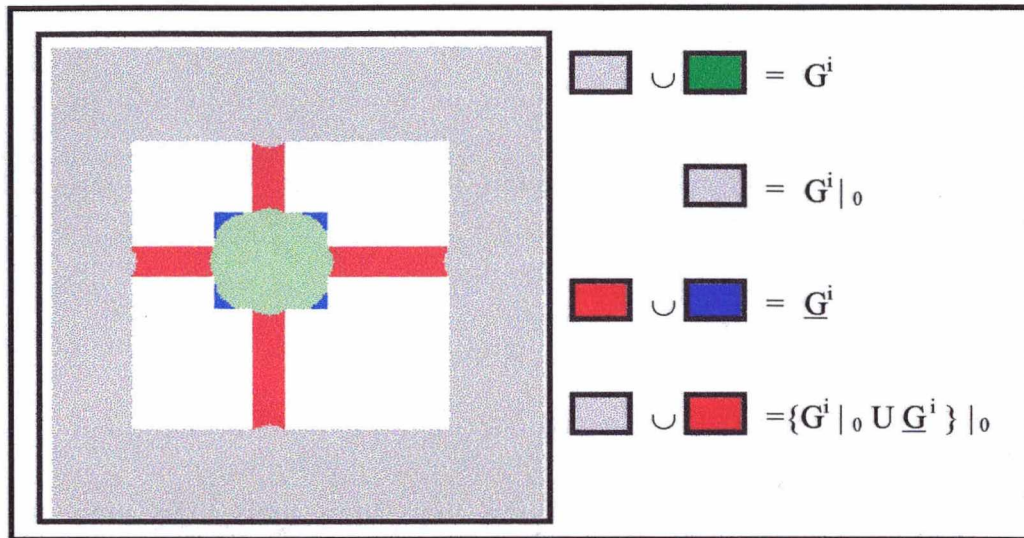


Figura 3.4 - Exemplo das regiões auxiliares

Finalmente, define-se o não molhamento do fluido A. Se $\theta_{AB} < 90^\circ$ então o fluido A é molhante e o não molhamento da região A assume o valor $nm(\theta_{AB}) = 0$. Se $\theta_{AB} > 90^\circ$ então o fluido A é não-molhante, e o não molhamento da região A assume o valor $nm(\theta_{AB}) = 1$.

3.4- SOLUÇÃO PROPOSTA

Com as regiões auxiliares e as propriedades auxiliares apresentadas na seção anterior, é possível então propor a solução do problema geométrico como uma composição destas. Utiliza-se nesta seção um processo intuitivo para propor a solução. Na seção seguinte verifica-se se as restrições são respeitadas pela solução proposta.

Sabe-se que $A^i = F - B^i$, e então é possível determinar apenas B^i para se ter a solução.

Em primeiro lugar, analisa-se a função da compressibilidade do fluido A na solução de B^i . Para os dois casos (fluido A idealmente compressível ou idealmente incompressível), a solução para A^i_0 é a mesma, a diferença entre as soluções para A^i está nas porções do fluido A que não estão conectadas às câmaras.

Seja $B^i = X$ se $c_A = 1$ (A é idealmente compressível).

Se o fluido A é idealmente compressível, uma porção desconectada das câmaras pode mudar de forma, mas apenas diminuir de tamanho e ocupar uma região contida por aquela porção em passos anteriores (pois o processo é primário). Se o fluido é idealmente

incompressível, qualquer porção que se desconecta permanece indeformável durante os passos restantes do processo.

Se $B^i = X$ então $A^i = (F-X)$ (se $c_A = 1$).

E, então, se $c_A = 0$, $A^i = (F-X) \cup Y^i$. Portanto, como A^i e B^i são complementares em F , $B^i = X - Y^i$.

Agora é então necessário determinar B^i para o caso em que $c_A = 0$.

Se $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$, então o raio de curvatura das interfaces deve repousar no interior de B . O raio de curvatura repousa também no interior de G . E como qualquer ponto de B^i deve sempre possuir conectividade com as câmaras, uma boa proposta é que $B^i = G^i |_0$. A Figura 3.5 apresenta o resultado para um exemplo em que $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$ e $c_A = 1$. Pode-se imaginar, neste exemplo, o fluido B como sendo o mercúrio (cinza) adentrando as cavidades do meio poroso.

Por outro lado, se $\text{nm}(\theta_{AB}) = 1$, pode-se pensar que a proposta mais lógica seja $B^i = \underline{G}^i |_0$. No entanto $\underline{G}^i |_0$ é sempre um conjunto vazio, porque a região $G^i \supset (F-P)$. Então uma proposta melhor é $\{G^i |_0 \cup \underline{G}^i\} |_0$. Nesta proposta, é imaginado que de alguma forma o fluido B conseguiu acesso até os poros menores no passo inicial, como na Figura 3.6. Pode ser imaginado, neste exemplo, a água (cinza) adentrando as cavidades do meio poroso.

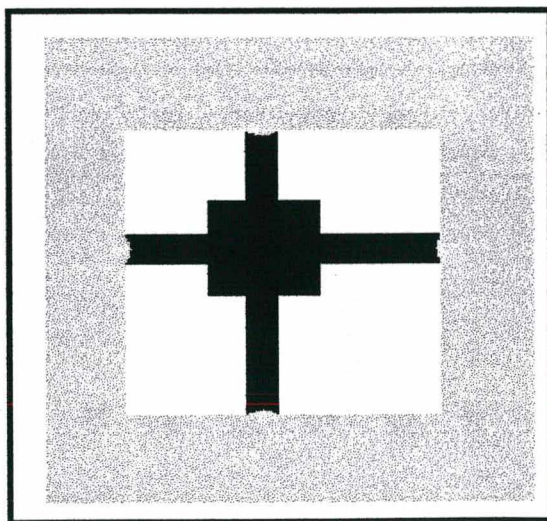


Figura 3.5 - Fluido não-molhante adentrando as cavidades

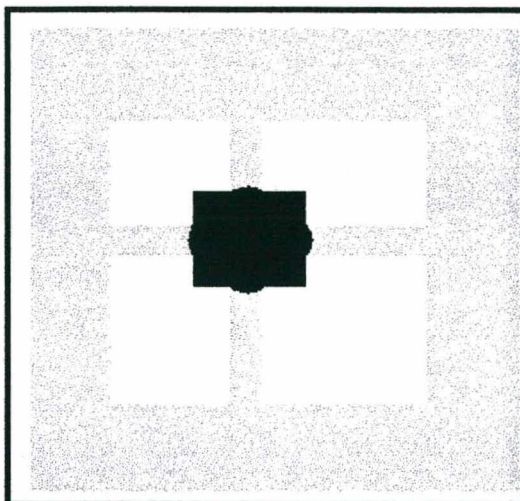


Figura 3.6 - Fluido molhante adentrando as cavidades

A solução proposta então é expressa como:

$$B^i = \{[nm(\theta_{AB}) \underline{G}^i] \cup G^i |_0\} |_0 - (1-c_A).Y^i \quad (3.3)$$

$$A^i = F - B^i \quad (3.4)$$

3.5- VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO

Nesta seção, a solução proposta é verificada, isto é, se a solução proposta respeita todas as restrições impostas, como resumido na Seção 2.4.

- A curvatura da interface $\Gamma_{A_j/B}^i$ entre a região B^i e a sub-região A_j^i deve ser C_j^i , que assume o valor $C_j^i = (p_{A_j}^i - p_B^i)/\sigma_{AB}$.

- A interface $\Gamma_{A_j/B}^i$ deve ser esférica e se o valor da curvatura for positivo o raio de curvatura deve estar contido na região A.

A curvatura da bola E_x^i é C_0^i . Então a curvatura da interface entre E_x^{*i} e a região F também é C_0^i , e a interface é esférica. Portanto a curvatura da interface entre $(\cup_x E_x^{*i})$ e a região F também é C_0^i , e a interface é esférica.

Isto é verdade a não ser em algumas posições da interface, como na Figura 1.6, onde a curvatura não é definida. Aquele caso pode existir na solução, no entanto, como visto no Capítulo 1, este caso é considerado aceitável. Existam ou não posições na interface onde a curvatura não pode ser definida, para esta análise, o raio de curvatura da interface entre $(\cup_x E_x^i)$ e a região F é considerado C_0^i .

Logo, a curvatura da interface entre as regiões G^i , $G^i|_0$, \underline{G}^i , $\underline{G}^i \cup G^i|_0$ e a região F também é C_0^i , e a interface é esférica.

Agora a solução é verificada separadamente para os casos $c_A=1$ e $c_A=0$.

Se $c_A=1$ (fluido A idealmente compressível), a curvatura entre A^i e B^i é C_0^i e a interface é esférica, pois a curvatura das interfaces entre $G^i|_0$ e F ou $\underline{G}^i \cup G^i|_0$ e F é C_0^i . Como visto no capítulo anterior, se $c_A = 1$, $p_{A_j}^i = p_0^i$. Isto significa que $C_j^i = C_0^i$. Então, a solução respeita as duas restrições acima se $c_A = 1$.

Analisa-se agora o caso $c_A = 0$. Neste caso, a curvatura entre A_0^i e B^i é C_0^i . E estas regiões (como visto no caso em que $c_A = 1$) respeitam as duas restrições listadas acima.

Suponha uma região $A_{j \neq 0}^{i > k} \subset A_{s \neq 0}^k \subset A_0^{k-1}$ (ou seja, esta região se desconecta das câmaras no passo $k-1$). Esta região é uma componente conexa da região Y^{k+1} , e a curvatura da interface entre $A_{s \neq 0}^k$ e a região B^k é C_0^k .

Esta região é sempre uma componente conexa de $Y^{i > k+1}$, uma vez que as demais regiões $A_{t \neq 0}^{f > k+1} \subset A_0^{f-1 > k}$ que podem vir a compor $Y^{i > k+1}$ não podem estar conectadas à $A_{s \neq 0}^k$. Logo, $A_{j \neq 0}^{i > k} = A_{s \neq 0}^k$. E portanto a curvatura da interface entre $A_{j \neq 0}^i$ e B^i é C_0^k , onde k é o passo em que a região ocupada por $A_{j \neq 0}^i$ desconectou-se das câmaras.

Como visto no capítulo anterior, se $c_A = 0$, $C_{j \neq 0}^{i \neq 0} = C_0^k$. Então os dois enunciados acima são satisfeitos pela solução proposta.

Se a região que ocupa o espaço ocupado por A_j^i não foi ocupada por uma região A_0^k em nenhum passo anterior do processo então esta pode ser uma região que não possui conectividade às câmaras pelo interior de F, e portanto não existe interface entre esta região e a região B em nenhum passo do processo.

- A^i e B^i devem ser complementares em relação à F

A^i como proposto pela solução está contido em F .

Sabe-se que $Y^i \subset F$, uma vez que Y^i é uma composição de regiões A^k .

G^i é uma composição de partes de bolas contidas em F unidas à região $(F-P)$ então G^i também está contida em F . Logo \underline{G}^i também, já que as duas regiões, verde e verde complementar, são complementares em relação à F . Portanto qualquer de suas componentes conexas também estão contidas em F .

Logo B^i está contida em F , e como $A^i = F - B^i$ então A^i e B^i são complementares em relação à F .

- A^i e B^i devem ser tais que qualquer ponto x pertencente à $(B^i \cap L)$ não possa ser conectado a qualquer ponto y pertencente à $(A^i \cap L)$ por uma linha t contida em $(L - T)$.
- A^i e B^i sejam tais que $(A^i \cap L) = (A^j \cap L)$ e $(B^i \cap L) = (B^j \cap L)$.

Ou seja, não devem existir interfaces entre a região A^i e B^i no interior das câmaras. E, uma vez que um dos fluidos ocupa uma das câmaras no início do processo este fluido deve ocupá-la durante todos os passos do processo.

B^0 é um dado do problema e necessariamente não existem interfaces nas câmaras para o passo 0, como citado na Seção 3.2.

A região G^i inclui totalmente as câmaras $(F-P)$. Logo $G^i|_0$ inclui totalmente aquelas câmaras que eram ocupadas por B^0 .

Se então é suposto que não existe uma linha contida em G^i que una um ponto x pertencente à região $(A^0 \cap L)$ a um ponto y pertencente à região $(B^0 \cap L)$. Ou seja, não existe conectividade pelo interior da região verde no passo i entre uma câmara ocupada por A^0 e outra ocupada por B^0 . Então $G^i|_0$ inclui totalmente e somente aquelas câmaras que eram ocupadas por B^0 .

Como \underline{G}^i e G^i são complementares, então $\underline{G}^i \cap (F-P) = \emptyset$. E, portanto, $\{G^i|_0 \cup \underline{G}^i\}|_0$ inclui totalmente e somente aquelas câmaras que eram ocupadas por B^0 .

Como Y^i é a união de regiões A^j com $j \neq 0$ (regiões não conectadas às câmaras), então $Y^i \cap L = \emptyset$. E, portanto, Y^i não diminui de $\{G^i|_0 \cup \underline{G}^i\}|_0$ nenhum ponto pertencente às câmaras.

Logo B^i ocupa totalmente e somente as câmaras ocupadas por B^0 , e, conseqüentemente A^i ocupa totalmente e somente as câmaras ocupadas por A^0 . E, como A e B são complementares então não existe interface entre estas regiões nas câmaras, desde que não exista uma linha contida em G^i que una um ponto x pertencente à região $(A^0 \cap L)$ a um ponto y pertencente à região $(B^0 \cap L)$.

- B^i deve ser tal que $B^i \subset B^{i+1}$.

Como $(p_{A0}^i - p_B^i) \cdot (\theta_{AB} - 90^\circ) > 0$, $p_B^i \leq p_B^{i+1}$ e $p_{A0}^i = p_{A0}^0$, e pela definição de r^i sabe-se que $r^{i+1} \leq r^i$ se $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$ ou $r^{i+1} \geq r^i$ se $\text{nm}(\theta_{AB}) = 1$.

Se $r^{i+1} \leq r^i$ então $(\cup_x E^{*i+1}_x) \supset (\cup_x E^{*i}_x)$ como no exemplo da Figura 3.7 se é feito $K=i$ e $W=i+1$. E se $r^{i+1} \geq r^i$, então $(\cup_x E^{*i+1}_x) \subset (\cup_x E^{*i}_x)$, como no exemplo da Figura 3.7, se é feito $W=i$ e $K=i+1$. As conclusões tomadas neste parágrafo são verdadeiras se $U \subset \mathbb{R}^3$. Se $U \subset \mathbb{Z}^3$ pode haver um pequeno erro que é aceito neste trabalho e que será analisado no capítulo seguinte.

Agora analisa-se o caso em que $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$ (o fluido B , que adentra o meio poroso, é não molhante). Neste caso $(\cup_x E^{*i+1}_x) \supset (\cup_x E^{*i}_x)$ e portanto $G^{i+1} \supset G^i$ e $G^{i+1}|_0 \supset G^i|_0$.

$B^i = G^i|_0 - Y^i$ e $B^{i+1} = G^{i+1}|_0 - Y^{i+1}$ (no caso mais geral).

É sabido que $Y^{i+1} = Y^i \cup (A^i - A^i_0)$, e que $Y^i \cap B^i = \emptyset$ e $(A^i - A^i_0) \cap B^i = \emptyset$. Portanto Y^{i+1} não subtrai de $G^{i+1}|_0$ nenhum ponto pertencente à B^i . Daí $B^{i+1} \supset B^i$ se $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$.

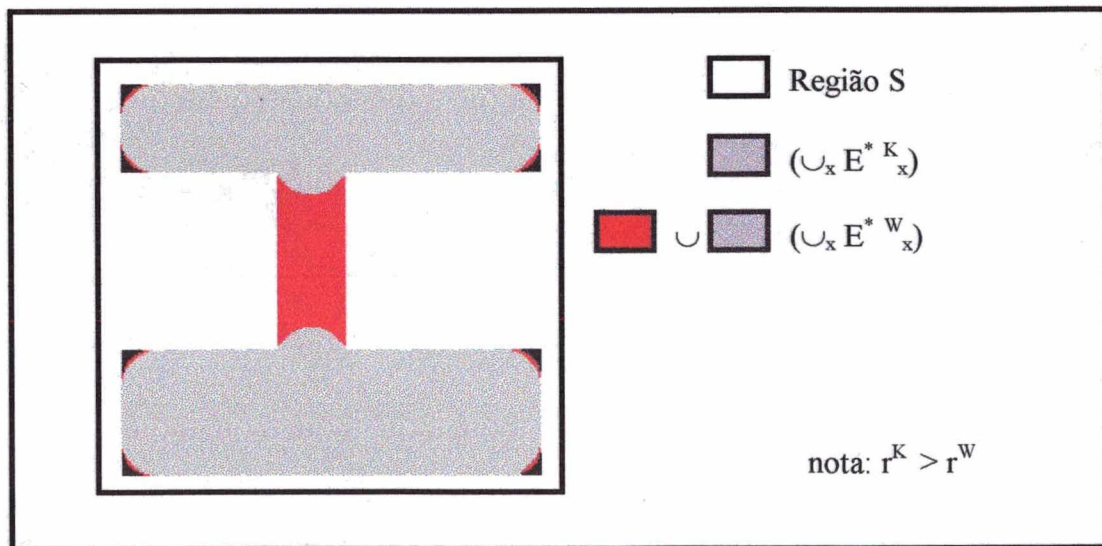


Figura 3.7 - Exemplo de regiões $(\cup_x E^{*i}_x)$

Se $nm(\theta_{AB})=1$ (o fluido B, que adentra o meio poroso, é molhante), $(\cup_x E^{*i+1}_x) \subset (\cup_x E^{*i}_x)$ e portanto $G^{i+1} \subset G^i$ e $G^{i+1}|_0 \subset G^i|_0$. Logo $\underline{G}^{i+1} \supset \underline{G}^i$. E neste caso, baseado em exemplos, como o da Figura 3.7, assume-se que $[\underline{G}^{i+1} \cup G^{i+1}|_0]|_0 \supset [\underline{G}^i \cup G^i|_0]|_0$. E portanto é assumido que $B^{i+1} \supset B^i$ se $nm(\theta_{AB})=1$.

- B^i seja tal que qualquer ponto x pertencente à B^i possa ser conectado à algum ponto y pertencente à região $(B^i \cap L)$ por uma linha t contida em B^i .

A região $\{[nm(\theta_{AB}) \underline{G}^i] \cup G^i|_0\}|_0$ certamente está conectada às câmaras devido à definição do operador $|_0$. Então se a região A é idealmente compressível ($c_A=1$) B^i está conectado às câmaras. É preciso então verificar se Y^i pode retirar a conectividade de algum ponto de B^i às câmaras (se $c_A=0$).

Diga-se que B^{i-1} era conectado às câmaras. Logo Y^{i-1} não retirou a conectividade de B^{i-1} às câmaras. $Y^i = Y^{i-1} \cup (A^{i-1} - A^{i-1}_0)$ e a região $(A^{i-1} - A^{i-1}_0)$ também não retira a conectividade de B^{i-1} uma vez que $A^{i-1} \cap B^{i-1} = \emptyset$. E como $B^{i-1} \subset B^i$ então Y^i não retira a conectividade às câmaras de $\{[nm(\theta_{AB}) \underline{G}^i] \cup G^i|_0\}|_0$ e como B^0 está necessariamente conectado às câmaras, então B^i para qualquer passo i também está.

- O ângulo de contato, θ_{AB} , formado entre as interfaces das regiões A/B, S/B e S/A deve assumir o valor $\theta_{AB} = \arccos((\sigma_{SA} - \sigma_{SB}) / \sigma_{AB})$ (medido no interior da região A).

Quando se faz $E^{*i}_x = E^i_x \cap F$ se $d_x \geq r^i \cdot \cos\theta$, garante-se (nos casos bidimensional e tridimensional) que o ângulo de contato formado na interface de interesse seja θ_{AB} , desde que a fronteira em torno do ponto y (ponto pertencente à fronteira de S com F que possua a menor distância ao ponto x) seja plana pelo menos no interior de um círculo de raio $(r^i \cdot \sin\theta)$ e desde que a matriz sólida possua sempre espessura maior que $r^{m\acute{a}x}(1-\cos\theta)$.

Aparentemente, o erro causado pela rugosidade das fronteiras (Figura 3.8) provoca apenas pequenos erros nas localizações das interfaces entre os fluidos.

Já o erro causado pela insuficiência de espessura da matriz sólida (Figura 3.9) provoca grandes erros. No entanto, se for utilizado sempre ângulo de contato 0° para a obtenção das

configurações e se, depois, as diferenças de pressão forem corrigidas (como será visto no Capítulo 4), a diferença na localização das interfaces é pequena e pode ser considerada aceitável.

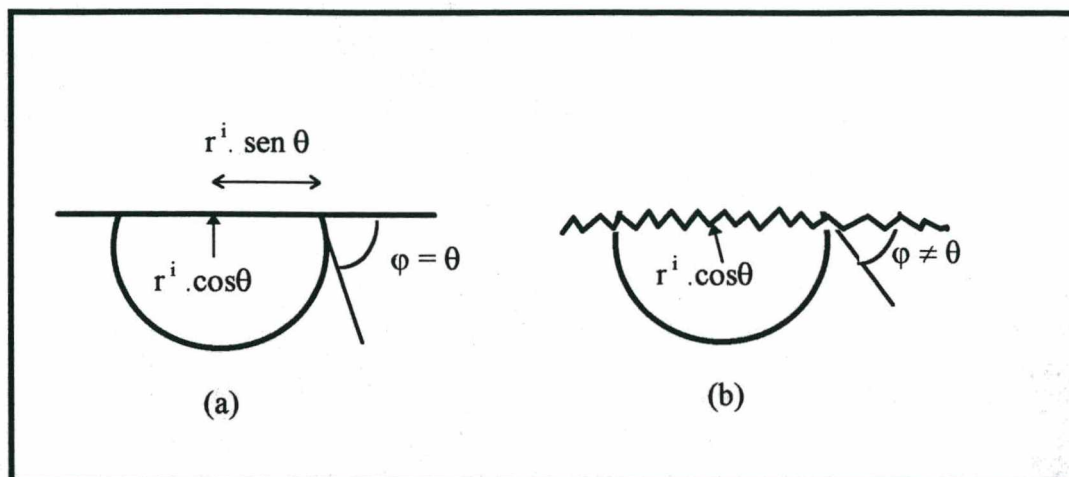


Figura 3.8 - Casos em que existe (b) e em que não existe (a) erro no ângulo de contato provocado pela superfície da matriz sólida

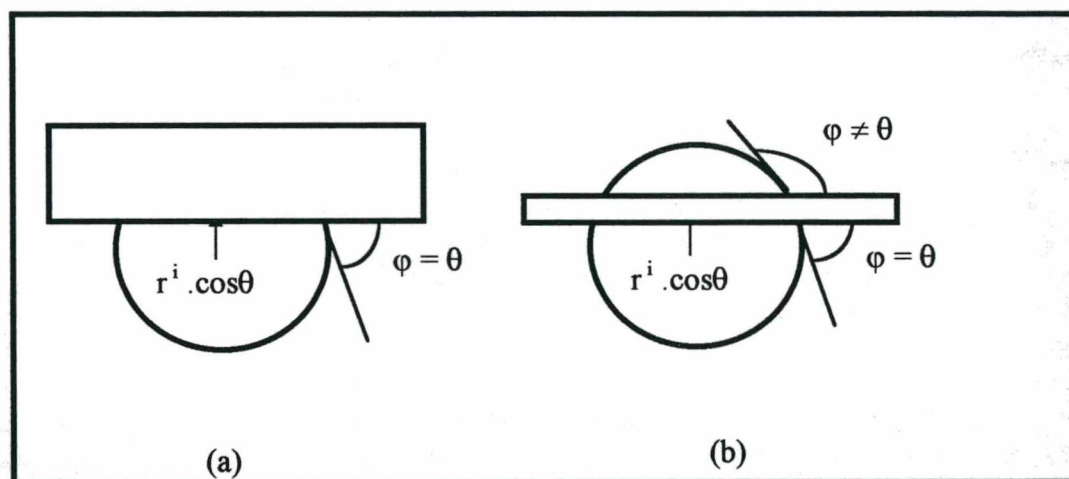


Figura 3.9 - Casos em que existe (b) e em que não existe (a) erro no ângulo de contato provocado pela insuficiência de espessura da matriz sólida

Portanto, assume-se que o ângulo de contato é respeitado pela solução, uma vez que é possível corrigir razoavelmente o erro provocado pela insuficiência de espessura da matriz sólida e que o erro causado pela rugosidade é aceitável.

- B^i seja tal que não possua qualquer pseudo-interface, no interior de P , com o módulo da curvatura superior à $|C_0^i|$ se $(\theta_{AB} < \pi/2)$ ou inferior à $|C_0^i|$ se $(\theta_{AB} > \pi/2)$.

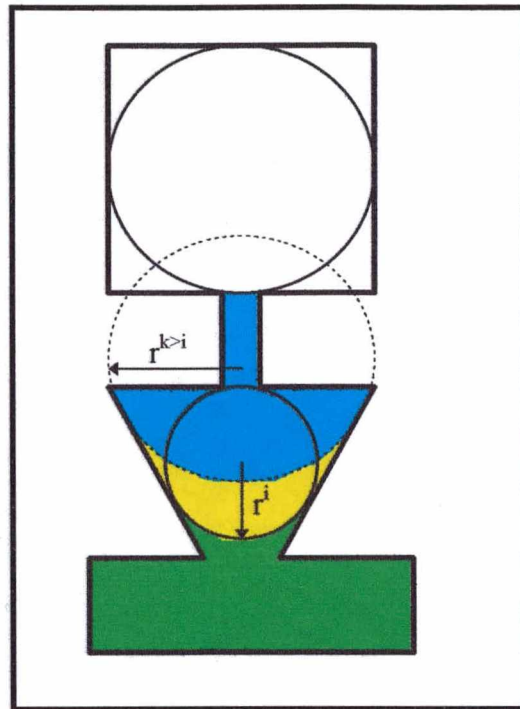


Figura 3.10- Solução para o caso $\text{nm}(\theta_{AB})=1$

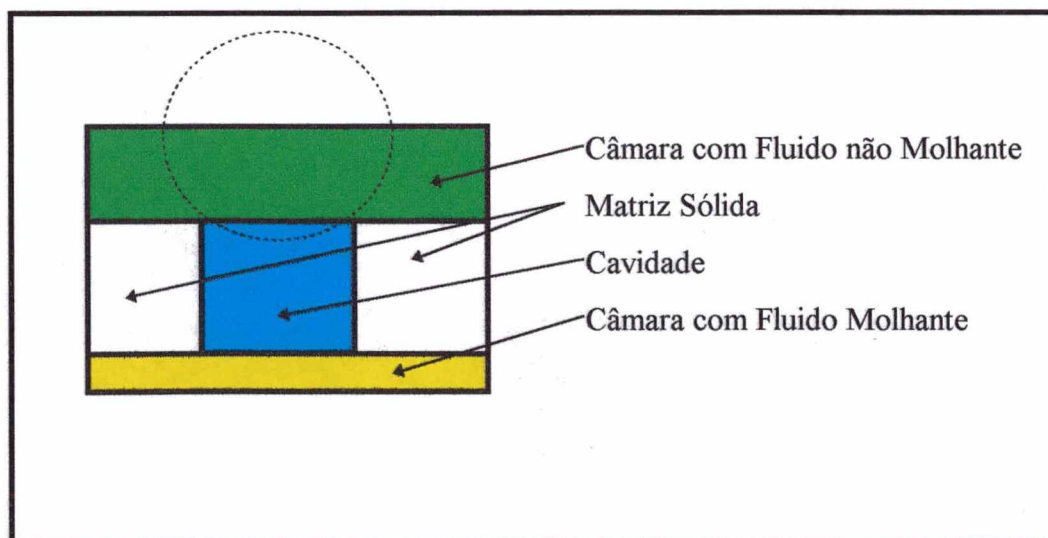


Figura 3.11 - Exemplo de Insuficiência de Tamanho das Câmaras

Pela definição de G^i , a maior curvatura em uma pseudo-interface na região $(G^i \cap P)$ é $|C_0^i|$. A curvatura da interface de Y^i (quando $\text{nm}(\theta_{AB})=0$) é necessariamente menor que $|C_0^i|$, porque $|C_0^{k< i}| \leq |C_0^i|$. Então, a restrição acima é respeitada se $\text{nm}(\theta_{AB})=0$.

No caso em que $\text{nm}(\theta_{AB})=1$, a restrição acima não é necessariamente satisfeita pela solução, como na Figura 3.10. Naquele caso, a solução proposta apresenta como resultado $B^i = (\text{região verde} \cup \text{região azul} \cup \text{região amarelo})$. No entanto, a solução esperada seria a região $B^i = (\text{região verde} \cup \text{região amarelo})$. Neste trabalho convive-se com este erro na solução. Na medida do possível, analisam-se nos resultados da simulação, o efeito deste erro.

Outra limitação da solução, que pode ser vista no exemplo da Figura 3.11, é a insuficiência de tamanho das câmaras que contém o fluido não-molhante. Naquele caso, a interface esperada é a linha tracejada, no interior da cavidade. No entanto, a solução não proporciona esta configuração de equilíbrio. Uma maneira de contornar este problema é garantindo que existam bolas de raio $r^{\text{máx}}$ contidas na câmara (que contém o fluido não molhante) que tangenciem toda a superfície comum entre esta câmara e a região meio poroso. No capítulo seguinte, utiliza-se um algoritmo, e um determinado sistema, em que isto é sempre garantido. Cabe salientar que as câmaras, em sistemas físicos reais, possuem dimensões bastante superiores às dimensões dos poros, ou não seriam chamadas de câmaras.

Este problema não ocorre nas câmaras que contém o fluido molhante. Ocorreria este problema apenas se houvesse conectividade entre as câmaras pelo interior da região G^i . Porém, neste caso, a solução não é mais válida, como visto acima.

3.6- COMENTÁRIOS SOBRE A VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO

Algumas das restrições não são totalmente verificadas ou ainda a solução proposta não respeita estas restrições em alguns casos. Nesta seção, por questão de organização, reúnem-se as hipóteses efetuadas na verificação da solução.

- Assume-se que o raio de curvatura da interface entre $(\cup_x E_x^{*i})$ e a região F também é r^i . Isto pode não ser verdade em algumas interfaces em que a curvatura não é definida, como no exemplo da Figura 1.6. No entanto, como citado no Capítulo 1, esta configuração será considerada aceitável.

•O ângulo de contato não é respeitado se a fronteira da matriz sólida for rugosa. No entanto, aparentemente este erro não provoca grandes erros nas configurações de equilíbrio e, portanto, é considerado aceitável.

•O ângulo de contato não é respeitado se a matriz sólida possuir espessura insuficiente. No entanto, este erro pode ser razoavelmente corrigido, como será visto no Capítulo 4.

•Assume-se que, se $r^{i+1} \leq r^i$, então $(\cup_x E^{*i+1}_x) \supset (\cup_x E^{*i}_x)$ e se $r^{i+1} \geq r^i$ então $(\cup_x E^{*i+1}_x) \subset (\cup_x E^{*i}_x)$. No entanto, estas relações são necessariamente verdadeiras apenas se $U \subset \mathbb{R}^3$. Se $U \subset \mathbb{Z}^3$, pode haver um pequeno erro que se considera aceitável e é analisado no capítulo seguinte.

•Assume-se que $[\underline{G}^{i+1} \cup \underline{G}^{i+1}|_0]_0 \supset [\underline{G}^i \cup \underline{G}^i|_0]_0$. Baseado em exemplos de diversos casos, esta relação de pertinência parece ser respeitada em todos os casos.

•A solução é válida (a menos dos erros que se consideram aceitáveis) desde que não exista uma linha contida em \underline{G}^i que una um ponto x pertencente à região $(A^0 \cap L)$ a um ponto y pertencente à região $(B^0 \cap L)$. Então, em cada passo do processo, deve ser verificado se esta linha existe ou não. Se esta linha existir, a solução não é mais válida.

• Convive-se com o erro de que a limitação das pseudo-interfaces não é necessariamente satisfeita pela solução proposta, no caso em que $\text{nm}(\theta_{AB})=1$.

• A dimensão das câmaras ocupadas pelo fluido não molhante devem ser apropriadamente escolhidas para que não ocorra o erro por insuficiência de tamanho das câmaras.

3.7- EXEMPLOS

Nesta seção, são apresentados dois exemplos. Esses exemplos são bidimensionais, para facilitar a visualização. No entanto, a solução proposta é válida para sistemas tridimensionais. Um exemplo apresentado é de um fluido não-molhante adentrando um meio poroso preenchido por um fluido idealmente compressível. Pode-se pensar neste exemplo como um processo de intrusão de mercúrio. O segundo exemplo é de um fluido molhante adentrando um meio poroso preenchido com um fluido idealmente incompressível. Este exemplo pode ser imaginado como um processo de embebição de água num meio preenchido de óleo.

3.7.1- Intrusão de Mercúrio

A Figura 3.12 apresenta o sistema no passo inicial. Os dados, como na Seção 3.2, respeitam os seus respectivos enunciados. Nota-se nesta figura que as interfaces entre os fluidos no passo inicial já possuem ângulo de contato 0° e curvatura constante. O cinza representa o mercúrio e o preto representa o vácuo.

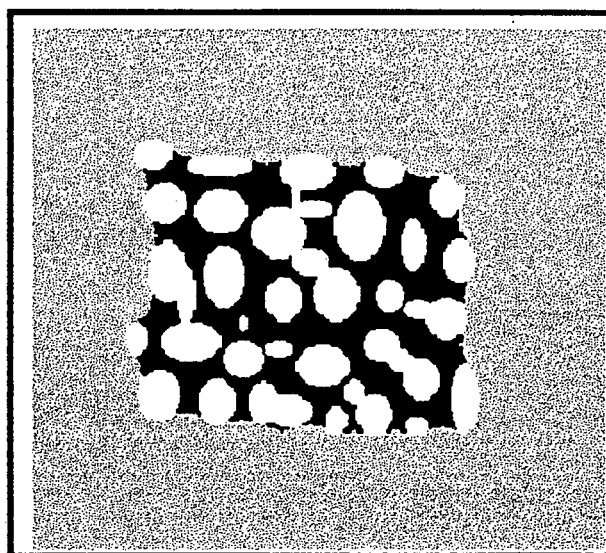


Figura 3.12 - Passo 0 de um processo de intrusão de mercúrio

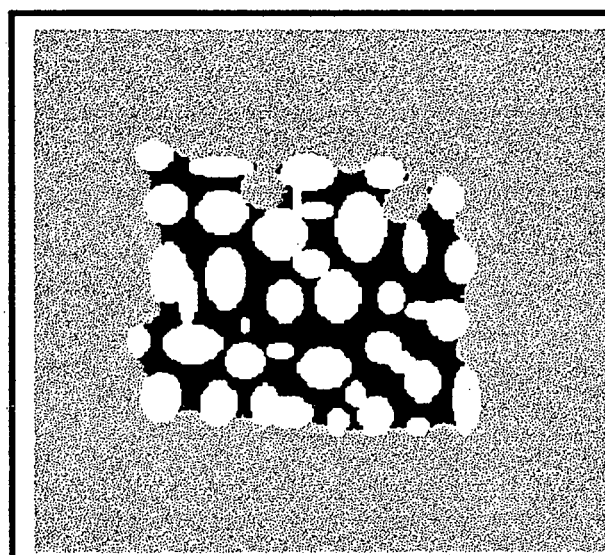


Figura 3.13 - Passo 1 de um processo de intrusão de mercúrio

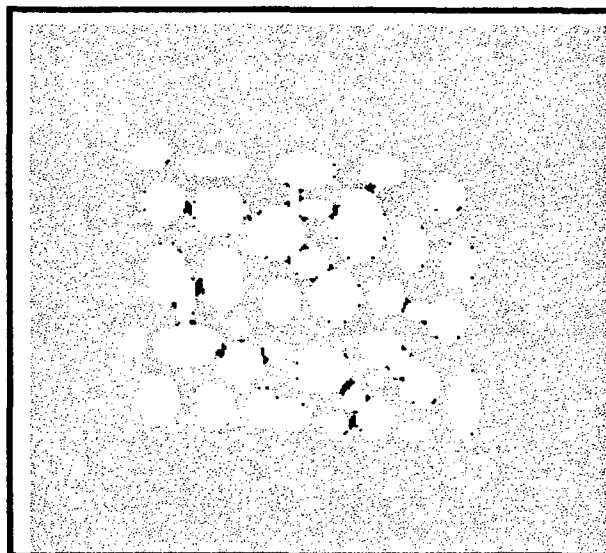


Figura 3.14 - Passo 2 de um processo de intrusão de mercúrio

Neste caso, $\text{nm}(\theta_{AB}) = 0$ e $c_A = 1$. Ou seja, o fluido A é molhante e idealmente compressível. A solução proposta para este caso é a Equação 3.5 (uma simplificação para este caso da Equação 3.3) e 3.4. Pode ser visto nas Figuras 3.13 e 3.14 os resultados das soluções para o passo 1 e 2.

$$B^i = G^i |_0 \quad (3.5)$$

3.7.2- Embebição de Água em um Sistema Água-Óleo

Na Figura 3.15 pode ser visto a configuração do passo inicial para um sistema água-óleo. A água é representada pela região cinza e o óleo pela região preta.

Neste caso $\text{nm}(\theta_{AB}) = 1$ e $c_A = 0$. Ou seja, o fluido A é não molhante e idealmente incompressível.

A solução para este caso é o conjunto de Equações 3.3 e 3.4. As Figuras 3.15-3.18 representam os passos do processo. Pode ser notado neste exemplo que a região B é sempre conectada às câmaras e, uma vez que uma parte do óleo desconectou-se das câmaras, esta não muda mais de forma, mantendo a curvatura.

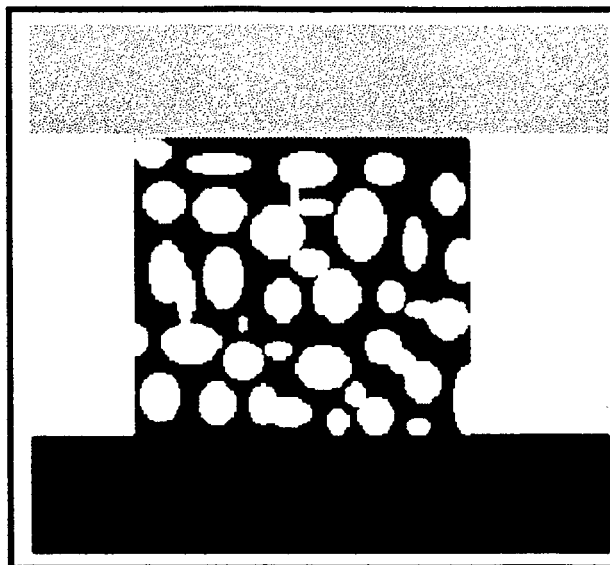


Figura 3.15 - Passo 0 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo

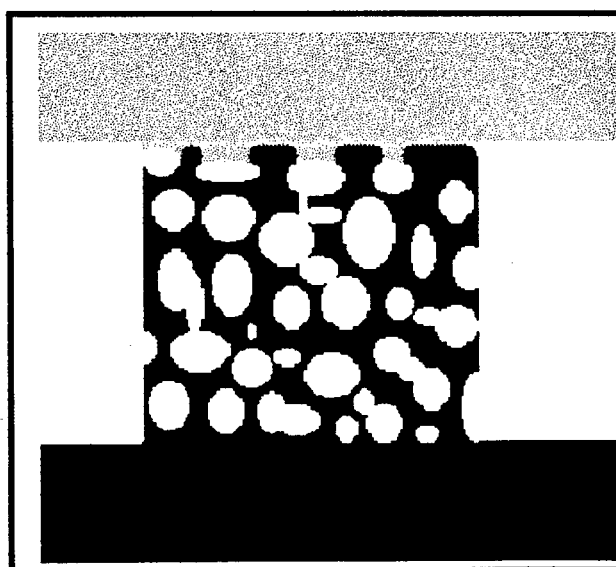


Figura 3.16 - Passo 1 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo

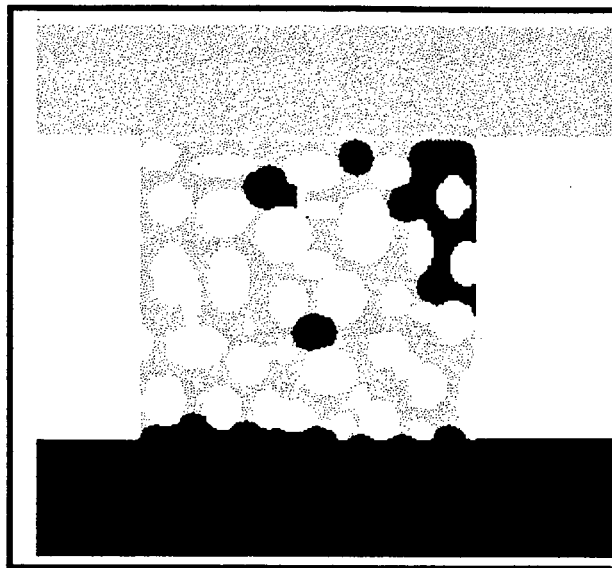


Figura 3.17 - Passo 2 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo

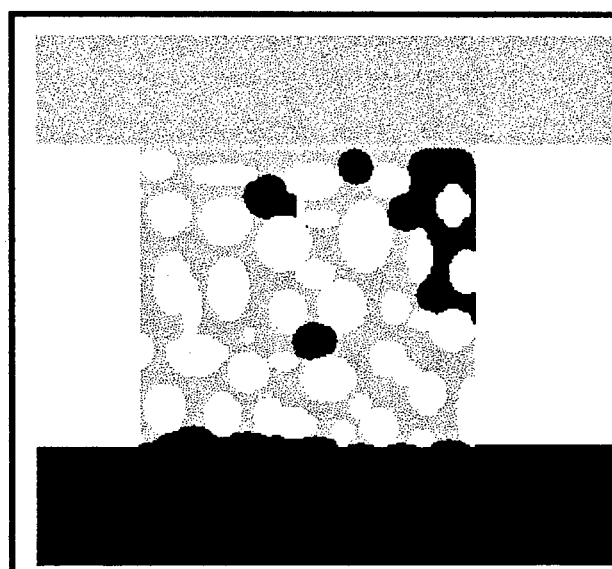


Figura 3.18 - Passo 3 de um processo de embebição de água num sistema água-óleo

CAPÍTULO 4 - TÉCNICAS

4.1- INTRODUÇÃO

Neste capítulo, são apresentadas técnicas que permitem a obtenção de resultados para a solução proposta no capítulo anterior. Devido à grande diversidade e complexidade da microgeometria dos meios porosos, as técnicas apresentadas neste capítulo são válidas apenas no espaço discreto tridimensional Z^3 . Na realidade, o que se chama neste trabalho de espaço discreto é um espaço euclidiano onde só se possuem informações sobre pontos uniformemente espaçados. A informação conhecida de cada ponto é então estendida a toda uma célula elementar cúbica centrada neste ponto.

As técnicas, da forma como são apresentadas neste capítulo, privilegiam a economia de memória de computador às custas do tempo de processamento. Na medida do possível, faz-se menção de como acelerar o processo às custas da memória gasta, modificando as técnicas. Utilizando as técnicas deste capítulo, é possível determinar as configurações de equilíbrio em um

sistema de $NX \times NY \times NZ$ células utilizando aproximadamente $2 \times (NX \times NY \times NZ)$ bytes de memória.

Novamente neste capítulo são utilizados exemplos bidimensionais para facilitar a visualização. Mas as técnicas são desenvolvidas para o caso tridimensional.

Para facilitar a leitura deste capítulo, são reapresentadas a solução proposta e as regiões auxiliares que são combinadas para compô-la:

$$B^i = \{[nm(\theta_{AB}) \underline{G}^i] \cup G^i \mid_0 \mid_0 - (1-c_A).Y^i \quad (4.1)$$

$$A^i = F - B^i \quad (4.2)$$

Sabe-se que:

$$Y^0 = \phi \quad (4.3)$$

$$Y^{i>0} = (A^{i-1} - A^{i-1}_0) \cup Y^{i-1} \quad (4.4)$$

e que:

$$\underline{G}^i = (F - G^i) \quad (4.5)$$

$$G^i = (F - P) \cup (\cup_x E^{*i}_x) \quad x \in F \quad (4.6)$$

e ainda que:

$$E^{*i}_x = E^i_x \cap F \quad \text{se } d_x > r^i \cdot \cos\theta \quad (4.7)$$

$$E^{*i}_x = \emptyset \quad \text{se } d_x \leq r^i \cdot \cos\theta. \quad (4.8)$$

Revedo as relações 4.1-4.8, é fácil notar que são necessárias técnicas para a obtenção de informações desde d_x até B^i . Estas técnicas basicamente podem ser divididas em três tipos: técnica para obtenção de d_x , técnica para obtenção de G^i e técnicas para obtenção de componentes conexos de interesse, que são $G^i \mid_0$, $[\underline{G}^i \cup G^i_0] \mid_0$, A^i_0 e Y^i . Estas técnicas são apresentadas de forma genérica neste capítulo, e em forma de algoritmos no Apêndice A.

No capítulo anterior, foi apresentada a dificuldade de se obter uma configuração de equilíbrio que respeite o ângulo de contato quando existe insuficiência de espessura da matriz sólida. Na Seção 4.2, é apresentada uma maneira de se obter uma configuração de equilíbrio razoavelmente parecida com a esperada (aquela que respeita o ângulo de contato). Na Seção 4.3, é exposta a forma como os dados devem se apresentar, para estarem adequados às técnicas. Na Seção 4.4, é exposta a técnica geral para simular um processo. Na Seção 4.5, é apresentada a técnica para a obtenção da imagem de distância rotulada (ao quadrado) ao fundo, o que é equivalente a determinar d_x , utilizando a métrica euclidiana. Na Seção 4.6, apresenta-se a determinação de d_x , utilizando a métrica de chanfro d_{345} . Na Seção 4.7, é mostrado como é possível a obtenção da região verde G^i , tanto utilizando a métrica euclidiana como a d_{345} . Na Seção 4.8, são apresentadas técnicas para a obtenção de componentes conexos de interesse, esta técnica é independente da métrica utilizada. Finalmente na Seção 4.9, são tecidos alguns comentários acerca das técnicas utilizadas.

4.2- CORREÇÃO POSTERIOR DAS PRESSÕES PARA SE CONSIDERAR O ÂNGULO DE CONTATO

Mostrou-se, no capítulo anterior, a incorreção da solução quando a espessura da matriz sólida é inferior a $r^{\text{máx}} (1 - \cos\theta)$. Para contornar este problema, é possível seguir o seguinte procedimento. Seja r^i o raio da bola para um determinado passo do processo. E seja $r^{*i} = r^i \cdot \cos\theta$ (onde θ é obtido a partir do ângulo de contato θ_{AB} do sistema, como apresentado no capítulo anterior).

Obtém-se então a configuração de equilíbrio para o raio r^{*i} e $\theta = 0^\circ$, e se diz que a configuração obtida é equivalente à configuração esperada com os dados de curvatura e ângulo de contato reais. A Figura 4.1 apresenta a diferença entre as configurações nos dois casos, onde $d_a = r^i \cdot \cos\theta$ e $d_b = r^i$. Naquele exemplo, a região cinza claro é a região B^i se o procedimento proposto nesta seção é seguido. A região cinza (claro e escuro) é a configuração que respeita o ângulo de contato.

Este procedimento apresenta erro no ângulo de contato (que sempre é 0°) e no volume preenchido pelas fases (diferença na posição das interfaces). No entanto, uma cavidade é preenchida para o mesmo diferencial de pressão nos dois procedimentos. O volume da cavidade preenchida é bem mais representativo no volume total de uma das fases que a diferença na

localização da interface, portanto é razoável assumir que o procedimento aqui proposto provoca erros aceitáveis nas posições das configurações.

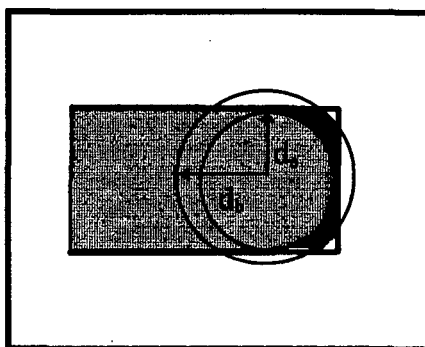


Figura 4.1- Diferença das interfaces quando se contorna o problema causado pela insuficiência de espessura da matriz sólida

As técnicas apresentadas neste capítulo são baseadas no raio r^i e não nos diferenciais de pressão. Portanto o que se faz é, uma vez obtidas as configurações para um determinado passo do processo assumindo ângulo de contato 0° , determinar o diferencial de pressão com a relação 4.9, que é a equação de Young-Laplace simplificada para o caso de interfaces esféricas com correção posterior do ângulo de contato.

$$p_B^i - p_{A0}^i = 2 \cdot \sigma_{AB} \cdot \cos(\theta) / r^i \quad (4.9)$$

4.3- DADOS

De forma que não haja insuficiência de tamanho das câmaras e que não haja conexão entre câmaras que são ocupadas pelo fluido A e B pelo interior da região verde utiliza-se, genericamente neste trabalho, o sistema representado esquematicamente na Figura 4.2. O algoritmo do apêndice A gera este sistema.

Na Figura 4.2, NX, NY e NZ são as dimensões do sistema. A região de cor preta representa as paredes, a região branca representa as câmaras superior e inferior e a região cinza representa a região meio poroso. A espessura das fronteiras do sistema é de uma célula. A espessura das cavidades da membrana é também de uma célula. nx, ny e nz são as dimensões do meio poroso.

Em qualquer tipo de processo estudado, a câmara superior contém o fluido não-molhante, e a câmara inferior o fluido molhante.

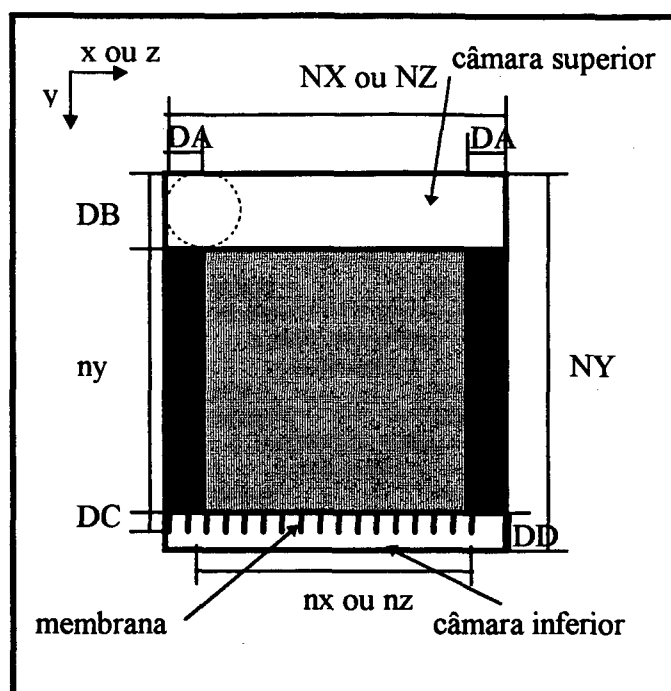


Figura 4.2 - Sistema Utilizado. A cor branca representa as câmaras, a cor preta representa o sólido e a cor cinza representa o meio poroso.

Seja $r^{\text{máx}}$ o raio da maior bola utilizada na simulação de um processo em um determinado sistema. Para que as interfaces na superfície superior do meio poroso possuam a curvatura desejada, DA deve ser maior ou igual a $r^{\text{máx}}+1$ (porque a fronteira possui espessura de 1 célula) e DB deve ser maior ou igual a $2.r^{\text{máx}}+1$. Para que a membrana tenha o comportamento desejado (que o fluido não molhante não adentre a câmara inferior), DC deve ser maior ou igual a 3 células. E DD, a altura da câmara inferior, deve ser no mínimo 5 (uma vez que a fronteira possui espessura de um célula e a membrana de 3).

No algoritmo do apêndice A, são utilizadas as mínimas dimensões necessárias, em função do maior raio utilizado nas simulações.

Na Figura 4.3, apresenta-se um exemplo bidimensional de sistema no espaço discreto, onde estão distinguidas todas as células elementares. As células cinza escuro representam as paredes, as células cinza claro representam a matriz sólida, e as brancas representam a região fluídica. Naquele caso $r^{\text{máx}}=3$, DA=4, DB=7, DC=3, DD=5, NX=29, NY=24, nx=21 e ny=12.

amarela possuem valor 2. A Figura 4.4 apresenta a matriz ternária associada ao sistema da Figura 4.3. Neste caso, não existe região amarela.

4.4- TÉCNICA PARA SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS

Parte-se de uma matriz ternária C , que representa o sistema, definida como exposto na seção anterior. No início do processo esta matriz possui apenas os valores 0 e 1.

Para cada raio do processo, transforma-se a matriz C (Seção 4.5 ou 4.6) de tal forma que suas células possuam como valor uma informação equivalente a d_x (d_x não é função do raio, no entanto esta informação é perdida quando se trabalha apenas com uma matriz e $c_A=0$). Depois transforma-se novamente a matriz C (Seção 4.7) de maneira que suas células representem a região G^i , e conseqüentemente a região \underline{G}^i . Com estas informações, é então possível transformar C (Seção 4.8) de tal forma que possua as informações de A^i , B^i e Y^{i+1} . Finalmente transforma-se a matriz C novamente em uma matriz ternária (com a informação da região amarela determinada no passo em questão), e efetua-se novamente todo este procedimento para o próximo raio do processo.

A Figura A.1, no apêndice A, apresenta, de forma mais detalhada, as transformações da matriz C . Nas próximas seções, a técnica é particionada e detalhada.

4.5- OBTENÇÃO DE d_x (utilizando a métrica euclidiana)

Esta seção ocupa-se da determinação de d_x utilizando a métrica euclidiana. A vantagem de se utilizar a métrica euclidiana é que não existem aproximações de distância e a desvantagem é o maior tempo de processamento necessário para a determinação de d_x e maior capacidade de memória utilizada (em alguns casos). Na realidade, para economia de memória, são determinados valores os quais podem ser reduzidos a d_x .

A distância entre os centros de duas células elementares que possuem face em comum assume o valor d_f (valor que é função da escala de discretização do sistema físico real), entre os que possuem aresta em comum assume o valor d_a e entre os que possuem vértice em comum assume o valor d_v . Assume-se que o valor de d_f é constante para quaisquer duas células elementares que possuam face em comum, e, então, é fácil notar que $d_a = d_f \sqrt{2}$ e $d_v = d_f \sqrt{3}$, uma vez que se utiliza a métrica euclidiana.

Para simplificar a técnica e economizar memória, faz-se durante a determinação das configurações, $d_f = 1$. A Equação 4.9 é então transformada na Equação 4.10. Desta forma, pode-se trabalhar com raios inteiros nas técnicas, e apenas no momento de determinar o diferencial de pressão é que se necessita da informação da distância real entre células elementares com face em comum, agora chamado de d_e .

$$p_B^i - p_{A0}^i = 2 \cdot \sigma_{AB} \cdot \cos(\theta) / (r^i \cdot d_e) \quad (4.10)$$

Como definido no capítulo anterior, d_x é a menor distância entre a célula elementar x e a matriz sólida. O que se deseja neste capítulo é a transformação da matriz ternária C em uma matriz que possua tanto as informações de d_x como as informações da região amarela.

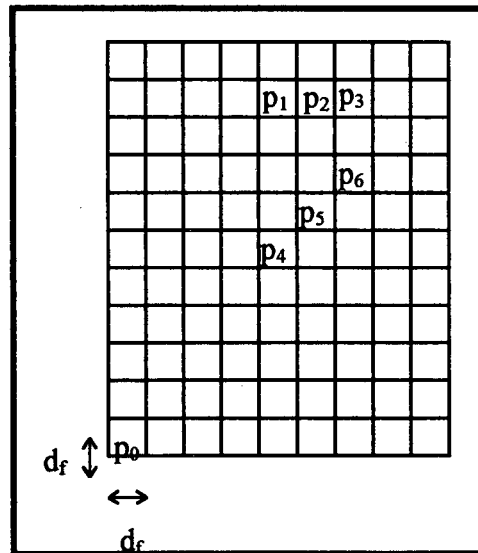


Figura 4.5- Determinação das distâncias das células elementares em relação a um ponto de origem

Sejam consideradas 3 células elementares com faces, arestas ou vértices em comum pelo centro dos quais se possa passar uma reta. A Figura 4.5 apresenta um exemplo em que se consideram 3 células elementares que possuem faces em comum (p_1 , p_2 e p_3), e 3 células elementares com arestas em comum (p_4 , p_5 e p_6). Da mesma forma, podem-se imaginar 3 células elementares com vértice em comum (p_7 , p_8 e p_9). Chama-se genericamente as células elementares

p_1, p_4 e p_7 de p_a , as células elementares p_2, p_5 e p_8 de p_b e as células elementares p_3, p_6 e p_9 de p_c . Quer-se determinar a distância entre p_c a p_0 , denominada d_{c0} , conhecendo-se d_{a0} e d_{b0} .

Pode-se verificar, facilmente, que:

$$d_{c0} = \sqrt{(2d_{b0}^2 - d_{a0}^2 + 2d_{ab}^2)} \quad (4.11)$$

O valor da distância d_{c0} , como determinado pela relação 4.11 é um valor pertencente ao conjunto dos reais. Portanto é necessário uma variável do tipo “float” para armazenar este valor na memória de um computador. Já o quadrado da distância é sempre um valor inteiro e exige uma variável do tipo “int”. Nas linguagens comuns de computador um tipo “float” ocupa 4 bytes e um tipo “int” ocupa apenas dois bytes. Com dois bytes uma variável inteira pode armazenar valores até 2^{16} . Como será visto posteriormente, no caso mais geral, é necessário dizer se uma célula elementar pertence ou não à região verde e ainda se pertence ou não à região amarela. Então o quadrado da distância pode possuir no máximo o valor 2^{14} . Portanto a maior distância de uma célula elementar à matriz sólida, em um determinado sistema, deve ser 2^7 células elementares. Caso contrário, pode-se utilizar o tipo float, convivendo com os erros de truncamento ou utilizar uma variável do tipo “long int”, que ocupa também ocupa 4 bytes.

Portanto convém utilizar o quadrado da distância:

$$d_{c0}^2 = 2d_{b0}^2 - d_{a0}^2 + 2d_{ab}^2 \quad (4.12)$$

Como $d_f = 1$, então $d_{ab} = 1$, se as células elementares possuem face em comum. Quando consideram-se células elementares com aresta em comum, $d_{ab} = \sqrt{2}$, e quando consideram-se células elementares com vértice em comum, $d_{ab} = \sqrt{3}$.

Se a imagem ternária C que contém 0's, 1's e 2's for transformada de forma que as células elementares que possuam valor 0 continuem com este valor, e aquelas que possuem valor 1 ou 2 passem a possuir como valor o quadrado da menor distância desta célula elementar a uma célula elementar de valor 0, então esta imagem passa a ser chamada de imagem de distância (ao quadrado) ao fundo, DQF. Para preservar a informação das células elementares da região amarela, estas células elementares possuem como valor o valor da distância ao quadrado ao fundo mais 2^{14} . Desta forma, obtém-se a imagem de distância rotulada (ao quadrado) ao fundo, DRQF. O que se faz então nesta técnica é $C(i,j,k)=DRQF(i,j,k)$. No apêndice A, apresenta-se

Considerem-se dois pontos (i_1, j_1, k_1) e (i_2, j_2, k_2) , e seja $d_{\max} = \max(|i_2 - i_1|, |j_2 - j_1|, |k_2 - k_1|)$. A distância, d_{12} , entre os pontos p_1 e p_2 é:

$$d_{12} = 2 \cdot d_{\max} + |i_2 - i_1| + |j_2 - j_1| + |k_2 - k_1| \quad (4.13)$$

Na Equação 4.13, pode-se observar que a distância entre células elementares de face comum é $d_f = 3$. A distância entre células elementares de aresta em comum é $d_a = 4$, e a distância entre células elementares de vértice em comum é $d_v = 5$.

Sejam p_i os 13 primeiros vizinhos de uma célula elementar p (ou seja, as células elementares que possuem face, aresta ou vértice em comum com a célula elementar p) cuja distância a uma célula elementar de origem seja menor que a distância do ponto p a este mesmo ponto de origem. Seja $v(p_i)$ a distância da célula elementar p_i ao ponto de origem, e seja $s(p_i) = v(p_i) + d_{ei}$, onde $d_{ei} = d_f$ se a célula elementar p_i possui face em comum com a célula elementar p , e $d_{ei} = d_a$ se possui aresta em comum e $d_{ei} = d_v$ se possui vértice em comum. A distância do ponto p a um ponto de origem, conhecendo-se a distância de seus vizinhos a este mesmo ponto de origem é:

$$d_p = \min(s(p_i)) \quad (4.14)$$

Uma vez que, utilizando a métrica d_{345} , $d_f = 3$, a Equação 4.9 é transformada na Equação 4.15 (onde d_e , assim como quando se utiliza a métrica euclidiana, é a distância real entre os centros de duas células elementares que possuem face em comum):

$$p_B^i - p_{A0}^i = 6 \cdot \sigma_{AB} \cdot \cos(\theta) / (r^i \cdot d_e) \quad (4.15)$$

Utilizando esta métrica, as distâncias sempre são números inteiros, e portanto pode-se utilizar variáveis tipo "int", que armazenam até 2^{16} , para sistemas que possuam poros com raios inferiores à $2^{14}/3$ células elementares. Podem-se utilizar ainda variáveis tipo "char", que armazenam até 2^8 , para sistemas que possuam poros com raios inferiores à $2^6/3$ (ou 21) células elementares.

Se a imagem ternária C que contém 0's, 1's e 2's for transformada de forma que as células elementares que possuam valor 0 continuem com este valor e aquelas que possuem valor 1 ou 2 passem a possuir como valor a menor distância (utilizando a métrica d_{345}) a uma célula elementar de valor 0, então esta imagem passa a ser chamada de imagem de distância ao fundo, DF. Para preservar a informação das células elementares da região amarela, estas células elementares

A Figura 4.8 apresenta as seções de uma bola de raio=2, utilizando a métrica euclidiana. Em cada célula elementar desta figura está a DQF em relação ao ponto central, as células elementares com $DQF \leq 4$ pertencem à bola. A Figura 4.9 apresenta uma bola de raio 2, utilizando a métrica d_{345} . Pode-se observar que as bolas de raio 2 são iguais utilizando qualquer uma das métricas. Para raios maiores, as bolas são diferentes. Utilizando a métrica euclidiana no espaço discreto, a bola tende a uma esfera utilizando a métrica euclidiana no espaço euclidiano. Utilizando a métrica d_{345} a bola tende a um sólido cujas seções nos eixos principais são aproximadamente octógonos utilizando a métrica euclidiana no espaço euclidiano.

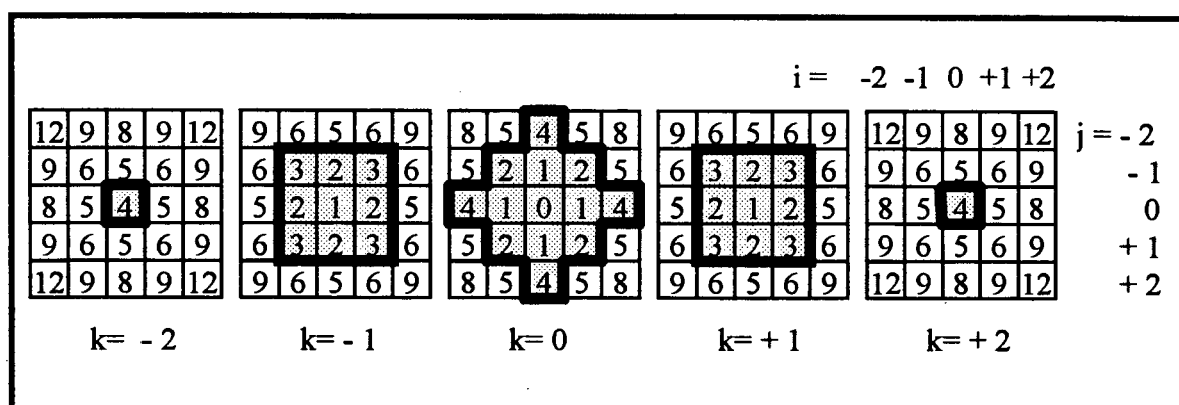


Figura 4.8 - Seções de uma Bola de raio 2 (utilizando a métrica euclidiana)

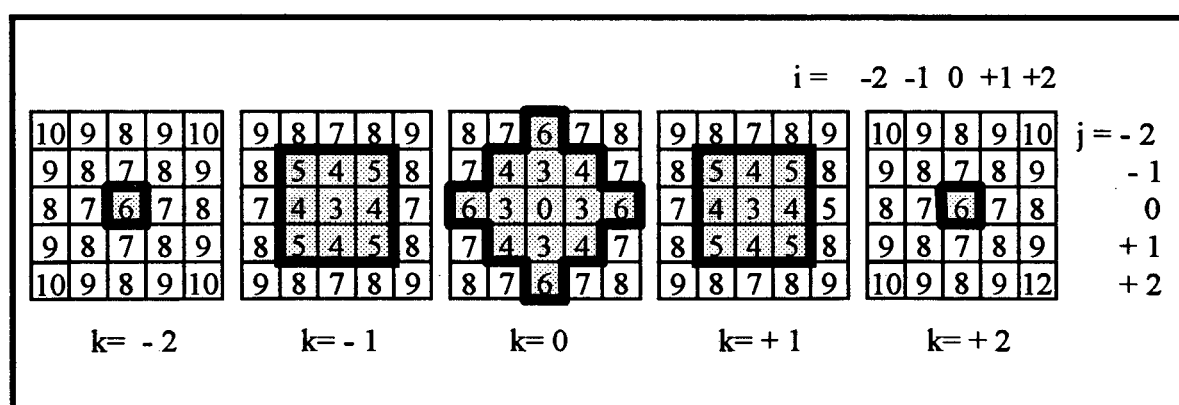


Figura 4.9 - Seções de uma Bola de raio 2 (utilizando a métrica d_{345})

Uma vez determinadas as bolas com um determinado r^i (para qualquer uma das métricas), deve-se determinar todas as células elementares da matriz C que sejam centro de uma bola deste raio que possua intersecção nula com células elementares de valor 0 (aquelas que representam a

raio que possua intersecção nula com células elementares de valor 0 (aquelas que representam a matriz sólida). Para possibilitar a utilização de apenas uma matriz na simulação dos processos, diz-se que uma determinada célula elementar pertence à $(\cup_x E^*_x)$ se possui valor negativo.

Utilizando-se a métrica euclidiana pode-se verificar que as células elementares que possuam $(r^i)^2 < |DQF| \leq (r^i + 1)^2$ são necessariamente centro de bolas que tangenciam a matriz sólida. Portanto percorre-se a imagem, e em cada célula elementar que satisfizer a condição acima centra-se uma bola de raio r^i nesta célula elementar e tornam-se negativos (se já não forem negativos) os valores das células elementares de C que possuem intersecção com a bola, ou seja, faz-se $C(r,s,t) = -|C(r,s,t)|$, onde os índices r, s e t são os índices das células que possuem intersecção com a bola. As células elementares que satisfazem à condição $|DQF| > (r^i + 1)^2$ são necessariamente centro de bolas que não tangenciam e possuem intersecção nula com a matriz sólida, e, portanto, apenas tornam-se negativos (se já não forem negativos) os valores destas células elementares. Desta forma, no final da operação de abertura, possuem-se as informações das células elementares que representam a matriz sólida ($DQRF=0$), das células elementares que representam a região amarela ($DQRF > 2^{14}$), e das células elementares que representam a região $(\cup_x E^*_x)$, ($DQRF < 0$).

Quando se utiliza a métrica d_{345} , o procedimento é o mesmo, tendo como diferença as condições para a determinação das células elementares que são centro de bolas que tangenciam a matriz sólida e que não tangenciam e não interseccionam a matriz sólida. Utilizando esta métrica, as células elementares que satisfazem $3.r^i < |DF| \leq 3.(r^i + 1)$ são necessariamente centros de bolas que tangenciam a matriz sólida. As células elementares que satisfazem a condição $|DF| > 3.(r^i + 1)$ são centro de bolas que nem tangenciam nem interseccionam a matriz sólida.

Como resultado desta operação obtém-se uma imagem rotulada. Se $|C(i,j,k)| > 2^{14}$ então (i,j,k) é um célula pertencente à região amarela. Se não, e se $C(i,j,k) > 0$, então a célula pertence à região G^i , e se $C(i,j,k) < 0$ então a célula pertence à região G^i e se $C(i,j,k) = 0$ a célula pertence ao sólido. A Figura 4.10 apresenta a região $(\cup_x E^*_x)$ do sistema da Figura 4.4, para $r^i=3$. As células verdes são os que pertencem à região em questão. Este exemplo serve tanto para a métrica euclidiana como para d_{345} , uma vez que as bolas bidimensionais para este raio são iguais.

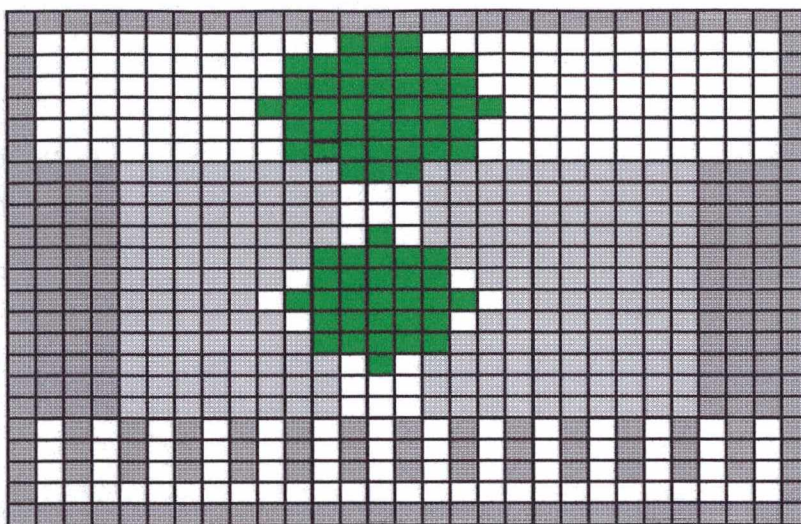


Figura 4.10- Região $(\cup_x E^*_i)_x$ para $r^i = 3$

Um problema que surge quando se trabalha com bolas no espaço discreto é que não necessariamente $(\cup_x E^*_i)_x \subset (\cup_x E^*_k)_x$, para $r^k \leq r^i$. Isto pode ser visto na Figura 4.11. Naquele caso, pode ser notado que não é possível preencher uma bola de raio 3 com bolas de raio 2 inclusas nesta. Pode ser notado, na Figura 4.12, que uma bola no espaço euclidiano pode sempre ser preenchida por bolas menores ou iguais inclusas nesta. Portanto, este problema não ocorre neste espaço.

Então, se a geometria das cavidades apresenta configurações parecidas com aquela, pode ocorrer que a condição $B^i \subset B^{i+1}$ (processo primário) não seja satisfeita. A relevância destes casos é discutida no Capítulo 5, quando são apresentados os resultados das simulações.

A matriz $C(i,j,k)$ obtida pode diferenciar então 4 tipos de células. No entanto, na obtenção das componentes conexas, é necessário diferenciar no mínimo 5 tipos de células: do sólido, da região verde, da região verde complementar, da região amarela e da câmara superior ou inferior. Portanto, torna-se necessária a perda da informação de DQRF. $C(i,j,k)$ é então transformada de forma que suas células possuam valor 0 se pertencem ao sólido, 1 se pertencem à região verde no interior do meio poroso, 2 se pertencem à região verde complementar no interior do meio poroso, 3 se pertencem à região amarela, 4 se pertencem à câmara que contém o fluido B e 5 se pertencem à região que contém o fluido A.

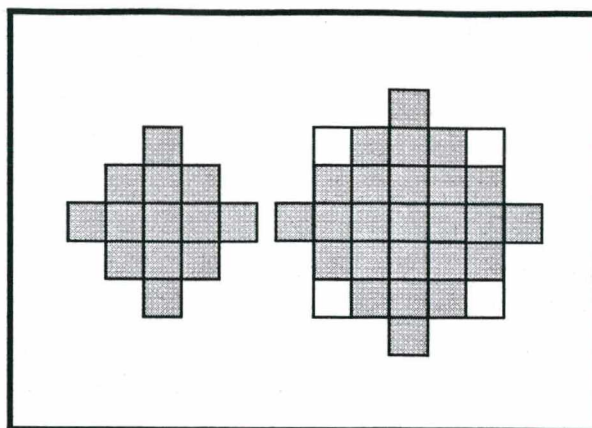


Figura 4.11- Bolas Discretas de Raio 2 Inclusas numa Bola de Raio 3

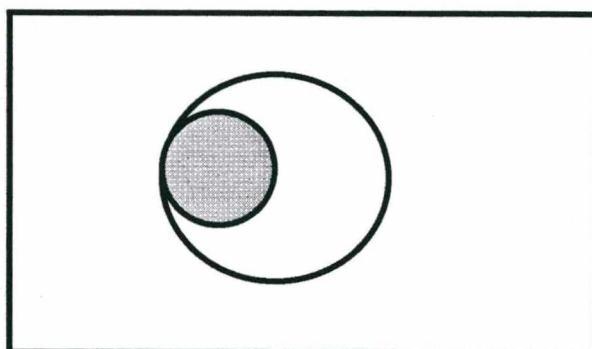


Figura 4.12- Bola Euclidiana Inclusa numa Bola Maior

A Figura 4.13 apresenta então a matriz ternária C onde as células cinza possuem valor 0, as células verdes possuem valor 1, as células brancas possuem valor 2, as células azuis possuem valor 4 e as células vermelhas valor 5, neste processo $nm(\theta_{AB})=1$.

4.8- OBTENÇÃO DE COMPONENTES CONEXOS DE INTERESSE

São quatro os tipos de processos possíveis, caracterizados por $nm(\theta_{AB})$ e c_A , que assumem valores 0 ou 1. Estes quatro tipos de processos são contemplados pelo algoritmo do apêndice A.

Se $nm(\theta_{AB})=0$ e $c_A=1$ (fluido não molhante adentrando um meio poroso preenchido por um fluido idealmente compressível) então deve-se determinar os componentes da região verde no interior das cavidades (valor 1) que possuem conectividade com a região $B^0 \cap L$ (valor 4). As células destas componentes conexas passam a ter valor 4, e obtém-se desta forma $B^i = G^i \mid_0$ (valor 4). Depois altera-se o valor das células de valor 1 restantes e de valor 2 para o valor 5, obtendo-se assim a região $A^i = F - B^i$ (valor 5).

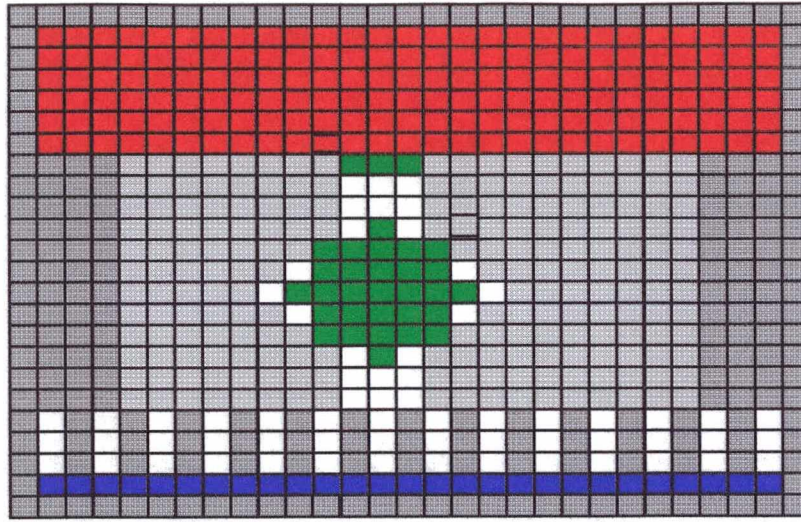


Figura 4.13- Regiões $G^i \cap P$ (verde), $B^i \cap L$ (azul) e $A^i \cap L$ (vermelho)

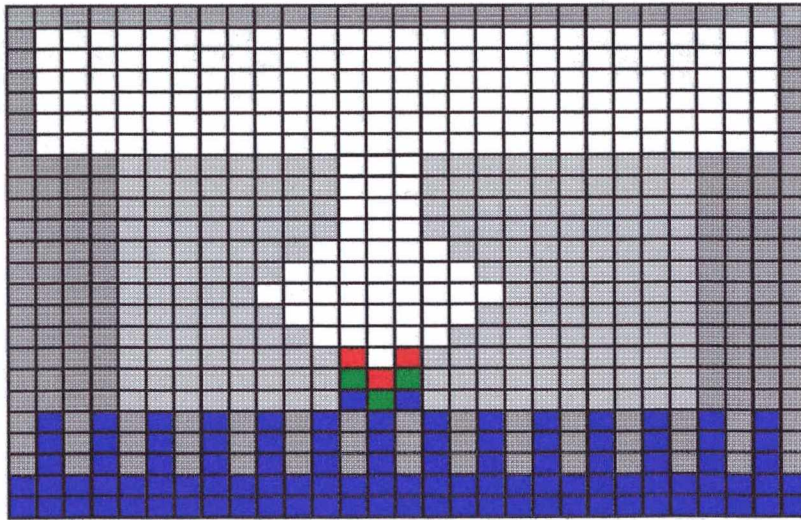


Figura 4.14- Região A^0 (azul), A^1 (azul e verde) e A^2 (azul, verde e vermelho) para um Processo de Embebição

Se $nm(\theta_{AB})=1$ e $c_A=1$ (fluido molhante adentrando um meio poroso preenchido por um fluido idealmente compressível) então deve-se determinar os componentes da região verde no interior das cavidades (valor 1) que possuem conectividade com a região $B^i \cap L$ (valor 4). As células destas componentes passam a possuir valor 4, e obtém-se desta forma $G^i|_0$ (valor 4). Depois determina-se as componentes conexas da região verde complementar (valor 2) que possuem conectividade com a região de valor 4, e as células destas componentes conexas passam

se o valor das células de valor 1 e de valor 2 restantes para o valor 5, obtendo-se a região $A^i = F - B^i$.

Se $nm(\theta_{AB})=0$ e $c_A=0$ (fluido não molhante adentrando um meio poroso preenchido por um fluido idealmente incompressível), então deve-se determinar os componentes da região verde no interior das cavidades (valor 1) que possuem conectividade com a região $B^i \cap L$ (valor 4). As células destas componentes conexas passam a ter valor 4, e obtém-se desta forma $B^i = G^i \setminus Y^i$. Após isto, determinam-se os componentes conexas que contêm as células de valor 1 restantes e valor 2 que possuem conectividade com a região $A^i \cap L$ (valor 5), obtendo-se a região A_0^i . Altera-se o valor das células de valor 1 e de valor 2 restantes para o valor 3, obtendo-se Y^{i+1} . $A^i = A_0^i \cup Y^{i+1}$.

Se $nm(\theta_{AB})=1$ e $c_A=0$ (fluido molhante adentrando um meio poroso preenchido por um fluido idealmente incompressível) então deve-se determinar os componentes da região verde no interior das cavidades (valor 1) que possuem conectividade com a região $B^i \cap L$ (valor 4). As células destas componentes passam a possuir valor 4, obtém-se desta forma $G^i \setminus Y^i$ (valor 4). Depois, determinam-se as componentes conexas da região verde complementar (valor 2) que possuem conectividade com a região de valor 4, e as células destas componentes conexas passam a possuir valor 4, e desta forma as células de valor 4 formam a região $B^i = \underline{G}^i \cup G^i \setminus Y^i$. Após isto, determinam-se os componentes conexas que contêm as células de valor 1 restantes e valor 2 que possuem conectividade com a região $A^i \cap L$ (valor 5), obtendo-se a região A_0^i . Altera-se o valor das células de valor 1 e de valor 2 restantes para o valor 3, obtendo-se Y^{i+1} . $A^i = A_0^i \cup Y^{i+1}$.

Em qualquer um dos quatro tipos de processo obtém-se uma matriz C cujas células que possuem valor 0 pertencem ao sólido, valor 3 à região Y^{i+1} , valor 4 à região B^i e a união das células que possuem valor 3 e 5 à região A^i . Neste momento do algoritmo, deve-se extrair os dados de interesse, ou contando as células de cada região ou armazenando as configurações, dependendo do caso. A Figura 4.14 apresenta as configurações de equilíbrio para um processo de embebição, variando o raio da bola de 1 a 3.

Imagine que deseja-se obter as componentes conexas da região que contêm células de valor H , que possuem conectividade com a região que contém células de valor J . O algoritmo percorre

a matriz C questionando se uma célula possui valor H, se possui e se tem algum vizinho com face comum que possui valor J, então a célula em questão passa a ter valor J. São efetuados dois percursos opostos na matriz C até que não exista nenhuma célula com valor H vizinho de face comum com uma célula de valor J. Esta parte do algoritmo é a que consome mais tempo de processamento, mas não usa mais memória. Outra maneira mais rápida de se obter as componentes conexas de interesse é utilizar o algoritmo proposto por Hoshen e Kopelman (1976) modificado para o caso tridimensional. No entanto, este outro método pode ocupar um vetor da mesma ordem de grandeza da matriz C (dependendo da complexidade da geometria), inviabilizando o algoritmo por questão de memória.

Para preparar a matriz C para um novo raio do processo, altera-se o valor das células de valor 4 e 5 para o valor 1, e das células de valor 3 para o valor 2.

4.9- COMENTÁRIOS FINAIS

Para modificar o algoritmo, desenvolvido para C tridimensional, em bidimensional, basta excluir deste qualquer operação das variáveis “z” e “k”. O algoritmo pode ser facilmente modificado para trabalhar com outras geometrias. Para isto é necessário modificar a inicialização da matriz C e os “loops”, de forma que estes percorram a região de interesse.

Como citado na seção anterior, o algoritmo pode se tornar mais eficiente em relação ao tempo de processamento se utilizar o método de rotulagem, Hoshen e Kopelman (1976) na determinação das componentes conexas de interesse. No entanto este método aumenta a memória de computador necessária.

Se não existe região amarela ($c_A = 1$) pode-se modificar o algoritmo de maneira que não seja necessária a determinação de DRQF em todo passo do processo. Para isto basta trabalhar com os valores de $|DRQF|$ acima de 2^{14} como valor para as células que pertencem à câmara superior ou inferior (depende do caso).

Utilizando uma membrana com espessura mínima de 3 células, assegura-se que não exista uma linha contida em G^i que una um ponto x pertencente à região $(A^0 \cap L)$ a um ponto y pertencente à região $(B^0 \cap L)$.

CAPÍTULO 5 - RESULTADOS

5.1- INTRODUÇÃO

Este capítulo é dedicado à apresentação e análise dos resultados obtidos por meio de simulações utilizando as técnicas propostas. São feitas comparações com dados experimentais, quando estes estão disponíveis, e análises qualitativas (ou estudo de casos), quando não se dispõe dos dados.

Utilizam-se como meio poroso matrizes tridimensionais reconstruídas a partir de uma amostra plana do material Berea 500mD. A caracterização por parâmetros de interesse deste material é apresentada na Seção 5.2. Na Seção 5.3, é exposto, em linhas gerais, o método utilizado para a reconstrução tridimensional do meio poroso. Na Seção 5.4, efetua-se uma comparação entre os parâmetros de interesse da amostra e do meio poroso reconstruído, e compara-se a utilização da métrica euclidiana e das métricas de chanfro d-34 (2-D) e d-345 (3-D). Na Seção 5.5, são apresentados dois sistemas utilizados para as simulações e, ainda nesta mesma seção, são apresentados os resultados e análises das simulações de intrusão de mercúrio. As Seções 5.6 e 5.7 são dedicadas a apresentar e analisar, respectivamente, simulações para o

processo embebição de um fluido molhante e invasão de um fluido não-molhante. Finalmente, na Seção 5.8, tecem-se comentários finais sobre as simulações.

5.2- AMOSTRA

A Figura 5.1 apresenta uma imagem digital de uma seção plana do material Berea 500 mD. A imagem possui 609x458 pixels, sendo que cada pixel corresponde a 2,6 micrometros. Esta imagem pertence a uma coleção de imagens coloridas obtidas por meio de microscopia ótica de transmissão no CENPES/PETROBRÁS. A imagem colorida obtida foi binarizada utilizando um método desenvolvido no LMPT/UFSC baseado na união de dois conjuntos de informações, provenientes respectivamente das bordas dos objetos e do histograma da imagem HUE. A imagem binarizada a partir da imagem da Figura 5.1 é apresentada na Figura 5.2. Na imagem 5.1, as porções pretas são compostas de óleo, e no processo de binarização estas partes são consideradas matriz sólida.

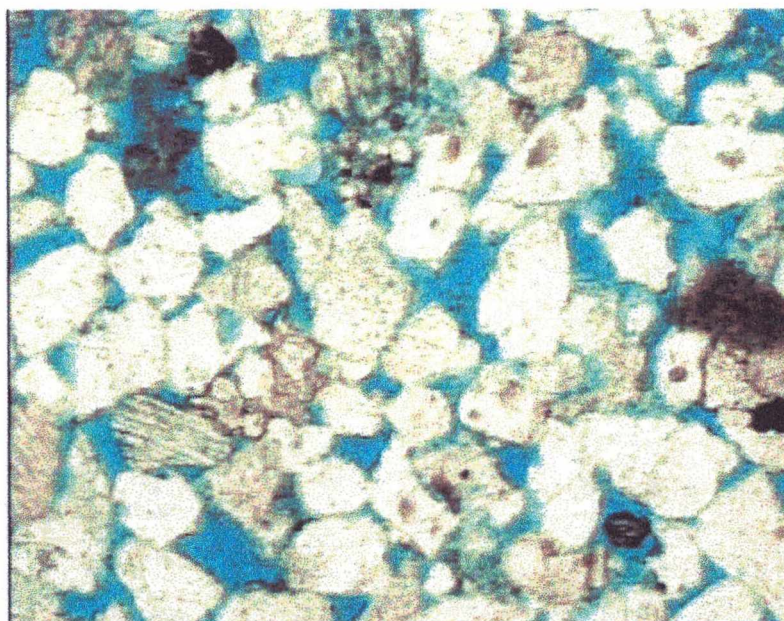


Figura 5.1 - Imagem Digital de um material Berea 500 mD

Esta coleção de imagens apresenta uma grande variação de porosidades (7%). Escolheu-se uma imagem que possuísse porosidade ótica razoavelmente próxima da porosidade determinada experimentalmente (aproximadamente 21%). Utilizou-se apenas uma amostra, e não uma média das informações obtidas a partir de várias amostras, porque não se sabe se esta variação é oriunda de erros na obtenção das amostras, no processo de binarização ou da não homogeneidade das

amostras para aquela escala (ampliação de 50X). De qualquer forma, seria necessária uma investigação mais profunda acerca destas amostras, o que não é objetivo neste trabalho.

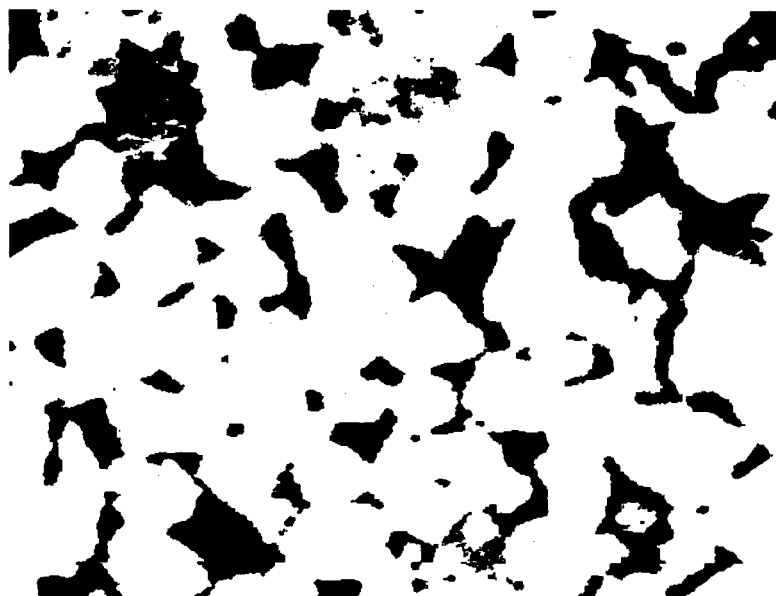


Figura 5.2 - Imagem Digital Binarizada de um material Berea 500 mD

O método utilizado para a reconstrução tridimensional deste material, exposto na Seção 5.3, resulta em uma matriz tridimensional em que a porosidade e a função autocorrelação (ou covariograma) são mantidas, ou seja, tanto a amostra quanto a matriz tridimensional possuem (ou deveriam possuir) o mesmo covariograma e a mesma porosidade. A porosidade, ϕ , é o número de pixels pretos em relação ao número total de pixels da imagem binarizada. A função covariograma, C_v , é definida como:

$$C_v(H) = E\{z(P+H).z(P)\} \quad (5.1)$$

onde P é um pixel da imagem, $z(P)$ é a função de fase, que retorna valor 0, se P é um pixel branco, ou 1, se P é um pixel preto, $E\{\}$ é o valor esperado da variável aleatória, e H é um vetor deslocamento a partir do ponto P . Uma vez que se supõe o meio poroso ser isotrópico, H pode ser considerado um escalar h .

Pode-se observar na Equação 5.1 que o covariograma é ϕ para deslocamento 0. Os valores de covariograma devem tender para ϕ^2 para deslocamentos tais que não existe mais correlação entre os objetos da imagem. O covariograma da imagem da Figura 5.2 é apresentado na Figura 5.3. Nota-se nesta figura que o covariograma não tende assintoticamente a ϕ^2 , isto pode estar

ocorrendo porque a imagem não é homogênea ou porque pode existir uma certa repetição de objetos na imagem, o que provocaria as ondulações no patamar da curva.

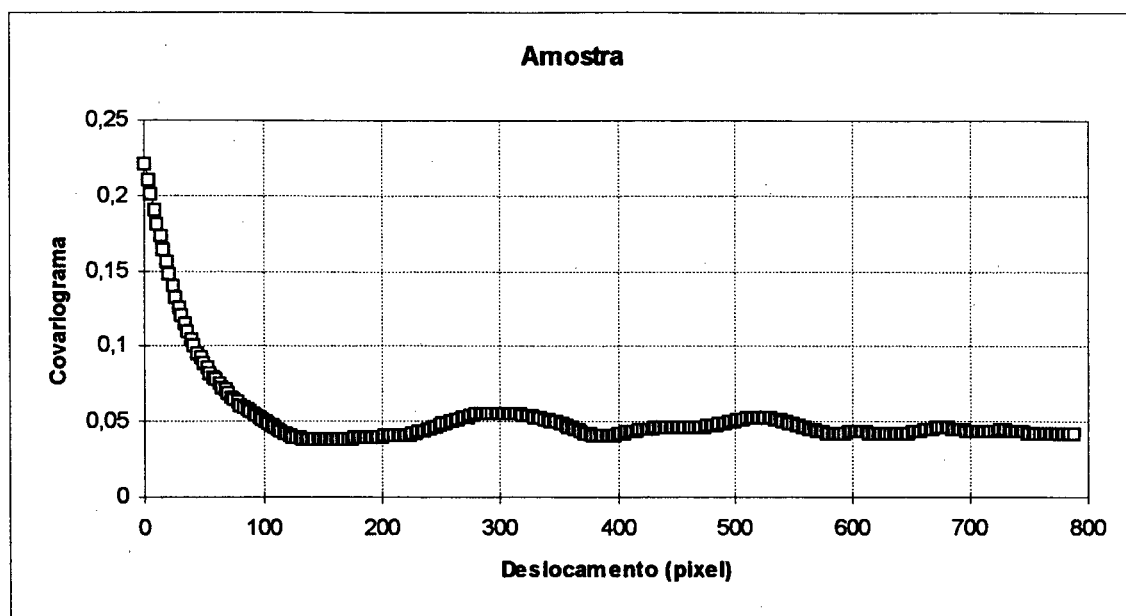


Figura 5.3- Covariograma da Amostra

O método utilizado para reconstrução mantém o covariograma e a porosidade. Outros parâmetros geométricos importantes que condicionam os processos de equilíbrio são a distribuição de volume de poros e a conectividade espacial entre os poros. Estes parâmetros não são necessariamente conservados na matriz reconstruída. Na Figura 5.4, é apresentada a distribuição de volume de poros da amostra em função do raio, utilizando a métrica euclidiana bidimensional e a métrica d_{34} . O algoritmo apresentado no apêndice A pode ser facilmente modificado para o caso bidimensional para determinar estas distribuições. O volume de poros pode ser determinado computando-se a intersecção da região verde com a região fase poro.

Pode-se observar, na Figura 5.4, a boa concordância entre as distribuições obtidas utilizando-se as duas métricas. Esta concordância ocorre para raios pequenos porque as bolas de raio pequenos são iguais, ou bem parecidas, utilizando-se as duas métricas. A concordância é boa para raios grandes porque a diferença entre as bolas, utilizando as duas métricas, está basicamente na forma do perímetro; e diferenças na forma de perímetros de objetos grandes provocam apenas pequenas variações no volume destes objetos.

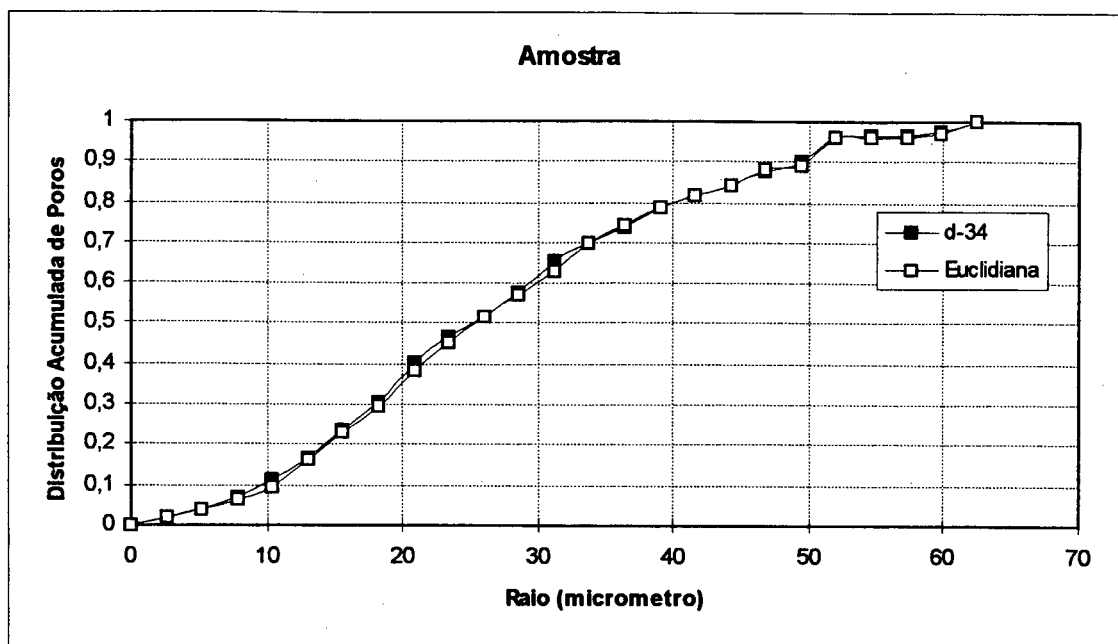


Figura 5.4- Distribuição de Volume de Poros da Amostra

5.3- MÉTODO DE RECONSTRUÇÃO DE JOSHI

Não se dispõe no momento e local de desenvolvimento deste trabalho qualquer ferramenta experimental que permita a obtenção direta, e determinística, da geometria tridimensional de um meio poroso (em qualquer escala que seja), como um microtomógrafo, por exemplo. Portanto, utiliza-se um meio poroso reconstruído por meio do método de Joshi, exposto em Quiblier (1984). Neste método, o objetivo é gerar uma matriz tridimensional que possua tanto a porosidade como a função covariograma (ou autocorrelação) da imagem original. O método de Joshi é exposto no apêndice B. Em linhas gerais o método parte de uma matriz tridimensional com distribuição gaussiana, e, após duas transformações, chamadas de filtro linear e filtro não linear, chega-se a uma matriz tridimensional com a porosidade e o covariograma dados.

A justificativa de manter-se a porosidade e a função covariograma é exposta a seguir. A função de fase de uma imagem do meio poroso pode ser considerada como um processo estocástico. Um processo estocástico pode ser decomposto em uma série infinita de momentos. Ao considerar-se que o processo estocástico é estacionário no sentido amplo, então os dois primeiros momentos são a porosidade e o covariograma, Papoulis (1965). Assume-se, neste método, que todas as informações da função de fase estão contidas nestes momentos.

Para viabilizar a reconstrução do meio poroso tridimensional, foi utilizado um alcance de correlação (no filtro linear) de 20 pixels, isto é, o covariograma é ϕ^2 para deslocamentos

superiores a 20 pixels, sendo que cada célula elementar nesta simulação corresponde a 5,2 micrometros. Note que a dimensão linear da célula elementar da matriz tridimensional corresponde ao dobro da dimensão linear do pixel da amostra. Este artifício provavelmente compromete a caracterização da rugosidade dos poros, e é utilizado devido a problemas de convergência do sistema não-linear (determinação dos coeficientes do filtro linear) e a um grande número de equações utilizadas na reconstrução pelo filtro linear.

5.4- COMPARAÇÃO ENTRE O MEIO RECONSTRUÍDO E A AMOSTRA

Foram geradas 6 matrizes, pelo método de Joshi, utilizando-se diferentes sementes no gerador de números pseudo-aleatórios. Destas matrizes, 3 possuem 100x100x100 células elementares (520x520x520 micrometros) e 3 possuem 150x150x150 células (780x780x780 micrometros). As matrizes com 100x100x100 células são chamadas de matriz A, B e C e as matrizes com 150x150x150 são chamadas de matriz D, E e F.

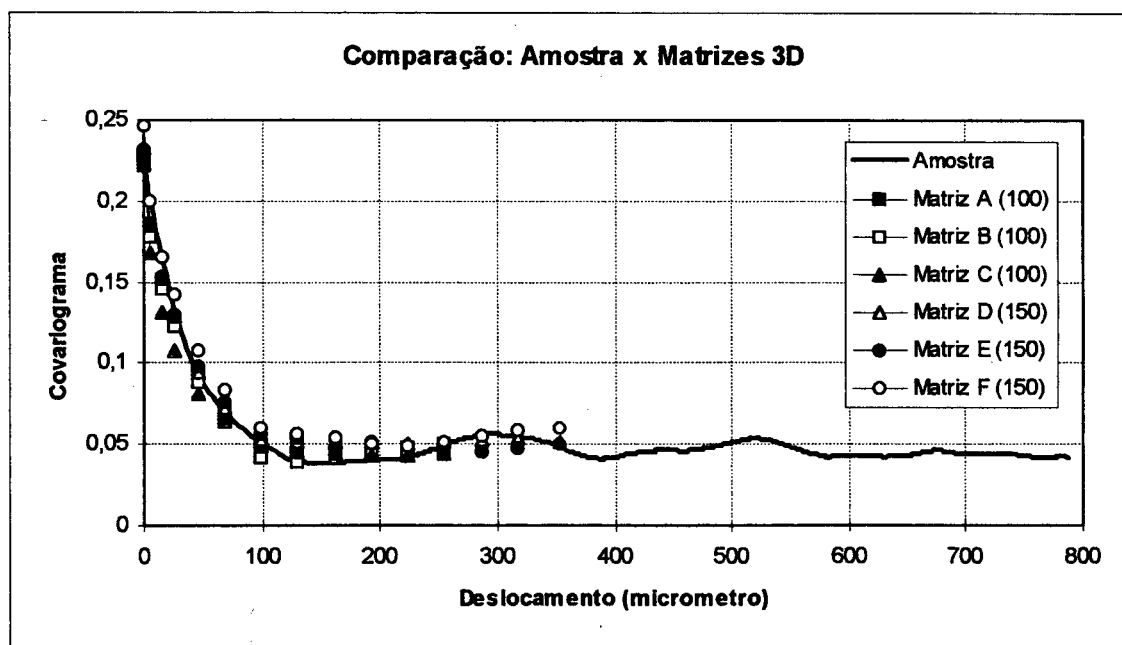


Figura 5.5- Comparação entre os covariogramas das matrizes reconstruídas e o covariograma da amostra

Na Figura 5.5, apresentam-se os covariogramas das matrizes. Pode-se notar, no gráfico, que os covariogramas das matrizes tridimensionais apresentam boa concordância com o covariograma da amostra.

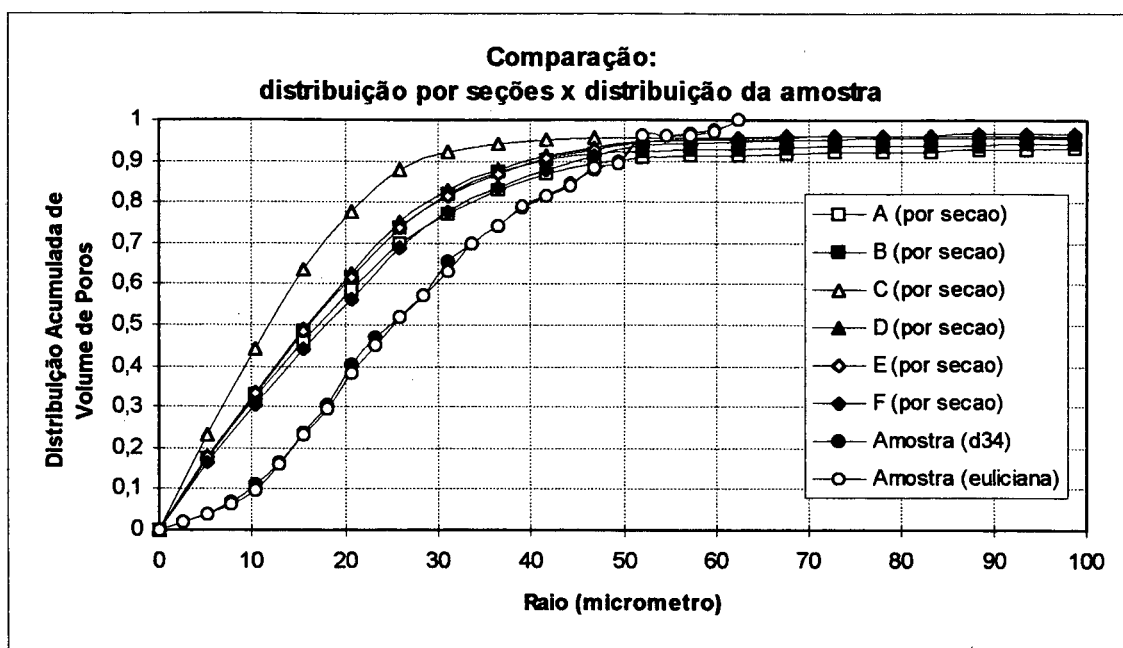


Figura 5.6 - Comparação entre a distribuição de volume de poros da amostra e a distribuição de volume de poros (por seção) das matrizes reconstruídas

Como citado na seção anterior, a distribuição de volume de poros parece ser uma característica bastante importante para a simulação de processos de equilíbrio e, portanto, deve ser mantida no processo de reconstrução. Na Figura 5.6, apresenta-se uma comparação entre a distribuição de volume de poros da amostra e a distribuição média de volume de poros por seção, a qual foi conseguida ao determinar-se a distribuição em cada seção plana das matrizes reconstruídas, efetuando-se uma média destas funções. Utiliza-se nestas determinações a métrica euclidiana bidimensional. Nota-se na Figura 5.6 que a distribuição da matriz C não concorda bem com a distribuição das outras matrizes. Pode-se observar que a discrepância ocorre principalmente para raios inferiores a três células elementares (15,6 micrometros). Esta matriz não é descartada das próximas análises porque, em primeiro lugar, esta apresenta boa concordância em relação à porosidade e ao covariograma, ou seja, foi reconstruída adequadamente (isto pode significar que, mantendo o covariograma e a porosidade, não necessariamente conseguem-se matrizes com a mesma distribuição de volume, ou ainda que a distribuição de volume é muito sensível a variações do covariograma) e, em segundo lugar, porque esta variação na distribuição pode enriquecer a análise dos processos simulados. As curvas de distribuição acumulada de volume de poros das matrizes reconstruídas, não alcançam o valor 1 porque o método utilizado para a determinação destas considera os poros de superfície. Uma vez que os poros de superfície possuem raio variando de um mínimo até infinito, no espaço euclidiano, ou até um máximo, no

espaço discreto, a distribuição acumulada tende à 1 para raios muito maiores que os realmente existentes no meio poroso. No caso das micrografias, o método utilizado desconsiderou os poros de superfície, e desta forma a distribuição acumulada desta tende a 1 para valores de raio compatíveis aos maiores poros existentes no meio poroso.

Outra característica das curvas na Figura 5.6 é a discrepância destas em relação à distribuição da amostra. Pode-se notar que a discrepância tem origem basicamente no valor de raio de uma célula elementar (5,2 micrometros). Espera-se que grande parte destes “poros” de raio 1 ou inferior corresponda à rugosidade do meio poroso. Isto pode ocorrer porque escolheu-se, por economia de memória e tempo de processamento, células elementares que possuem dimensão linear duas vezes maior que a dimensão linear dos pixels da amostra. Isto certamente modifica a rugosidade do meio poroso. Em todos os casos, as seções reconstruídas apresentam frequências de poros com raio menores que 20 micrometros superiores à seção original. Isto é, os meios reconstruídos apresentam maior frequência de poros menores.

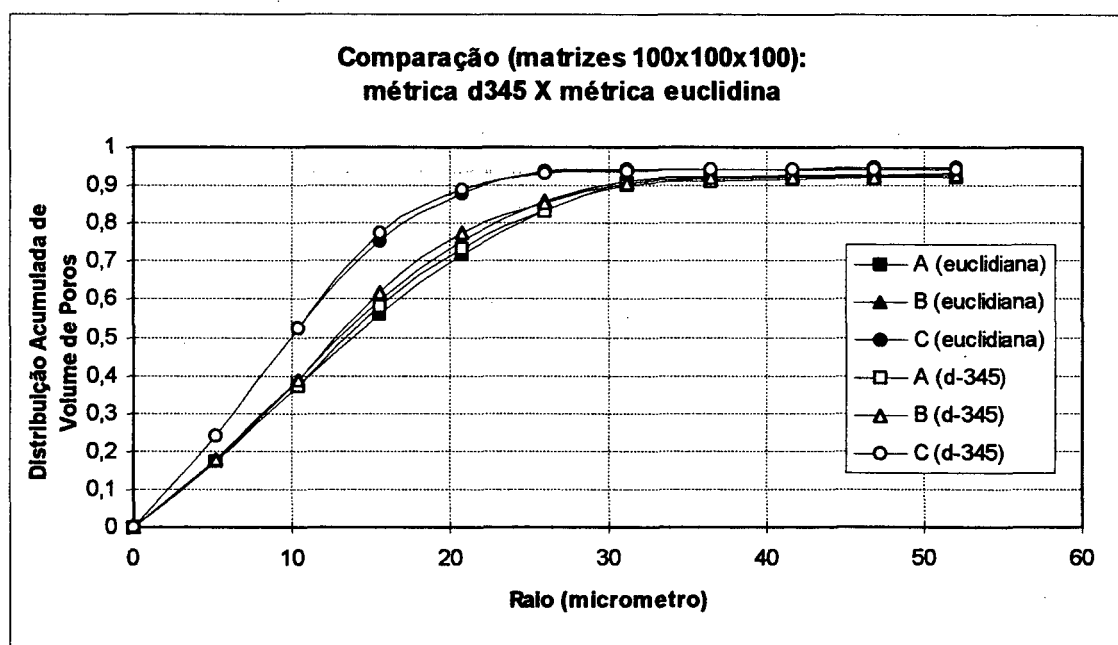


Figura 5.7- Distribuição de Volume de Poros das matrizes A, B e C (100x100x100) utilizando as métricas euclidiana e d_{345}

Agora são comparados os resultados de distribuição de volume de poros obtidos com a métrica euclidiana com os resultados obtidos pela métrica d_{345} . Como visto anteriormente, a distribuição de volume de poros é obtida contando as células elementares da região verde no

interior das cavidades, para cada raio de interesse. A Figura 5.7 apresenta as distribuições de volume para a imagem plana e para as matrizes reconstruídas A, B e C (100x100x100 células). A Figura 5.8 apresenta as distribuições para as matrizes reconstruídas D, E e F (150x150x150 células). Pode-se notar, assim como no caso bidimensional, que a distribuição da matriz C não apresenta boa concordância com as matrizes A e B, e ainda que as distribuições, utilizando as duas métricas tridimensionais, possuem boa concordância, pelo mesmo motivo da concordância nas distribuições bidimensionais.

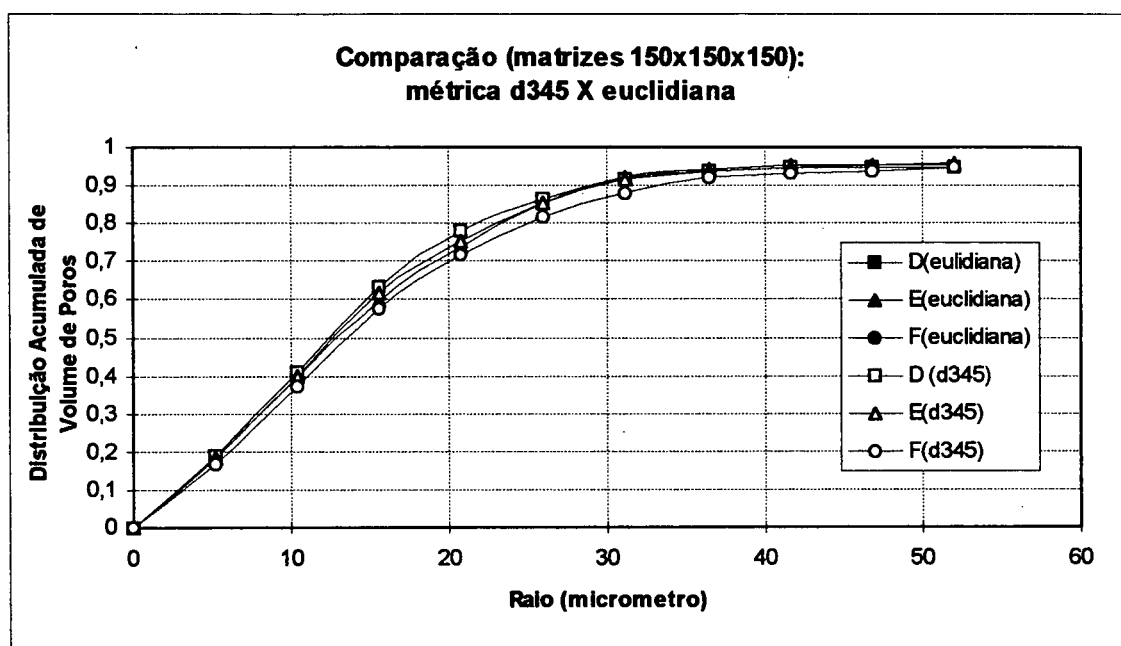


Figura 5.8- Distribuição de Volume de Poros das matrizes D, E e F (150x150x150) utilizando as métricas euclidiana e d_{345}

Nas Figuras 5.9 e 5.10 são apresentadas as comparações entre as distribuições de volume de poros tridimensional (utilizando métrica tridimensional) e bidimensional (por seção, utilizando métrica bidimensional). Pode-se observar, nestas curvas, que as distribuições tridimensionais, em todos os casos, apresentam um maior volume de poros com raio inferiores a 3 células elementares (15,6 micrometros) do que as distribuições bidimensionais.

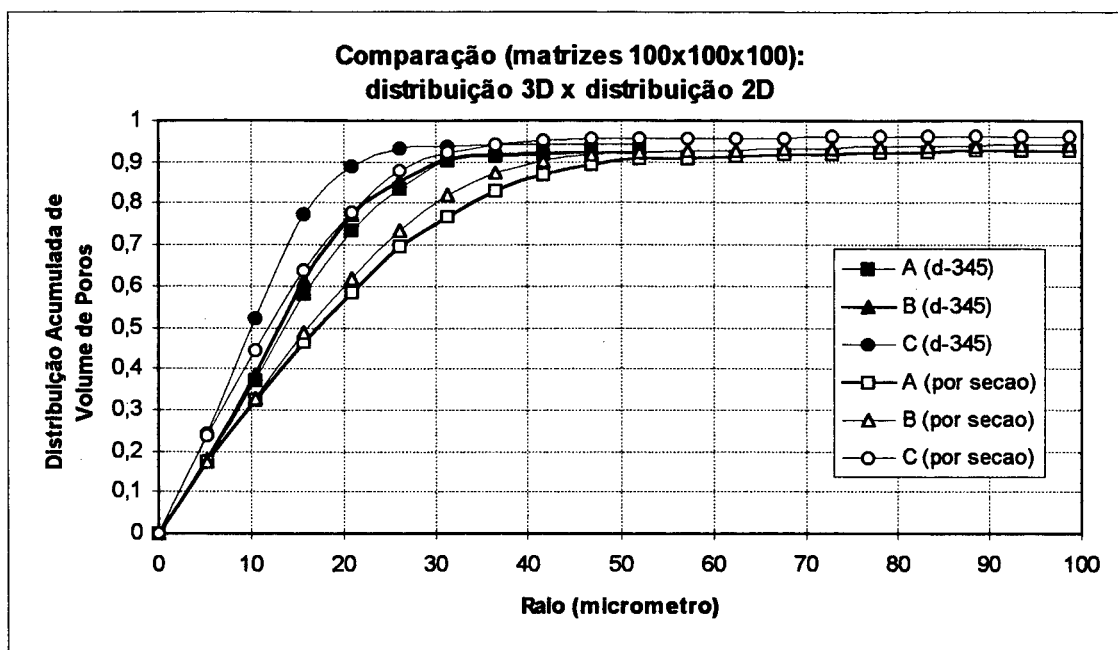


Figura 5.9 - Comparação entre as distribuições de volume de poros tridimensional e bidimensional (por seção) das matrizes A, B e C (100x100x100)

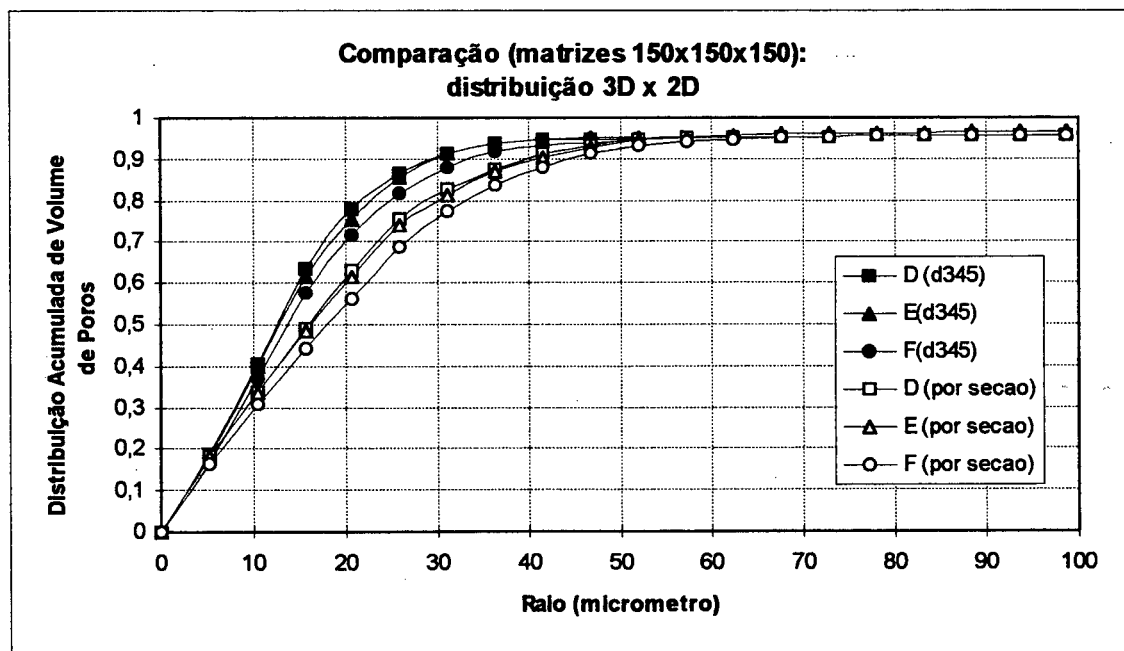


Figura 5.10 - Comparação entre as distribuições de volume de poros tridimensional e bidimensional (por seção) das matrizes D, E e F (150x150x150)

5.5- SIMULAÇÃO DE INTRUSÃO

Nesta seção, são apresentados os resultados das simulações de processos em que um fluido não molhante adentra um meio poroso preenchido por um fluido molhante idealmente compressível, por exemplo, um processo de intrusão de mercúrio. Para analisar os efeitos do tamanho das matrizes e a influência da superfície, foram utilizados dois sistemas na simulação do processo de intrusão de mercúrio, apresentados nas Figuras 5.11 e 5.12. Estes sistemas são tridimensionais, e o eixo horizontal das figuras pode ser considerado tanto o eixo x como o eixo z. Os valores são em células elementares. No sistema 1, apenas a câmara superior é ocupada pelo mercúrio, já no sistema 2 o mercúrio circunda totalmente o meio poroso. Nas Figuras 5.11 e 5.12, (X/Y) significa X células elementares para as matrizes 100x100x100 e Y células elementares para as matrizes 150x150x150.

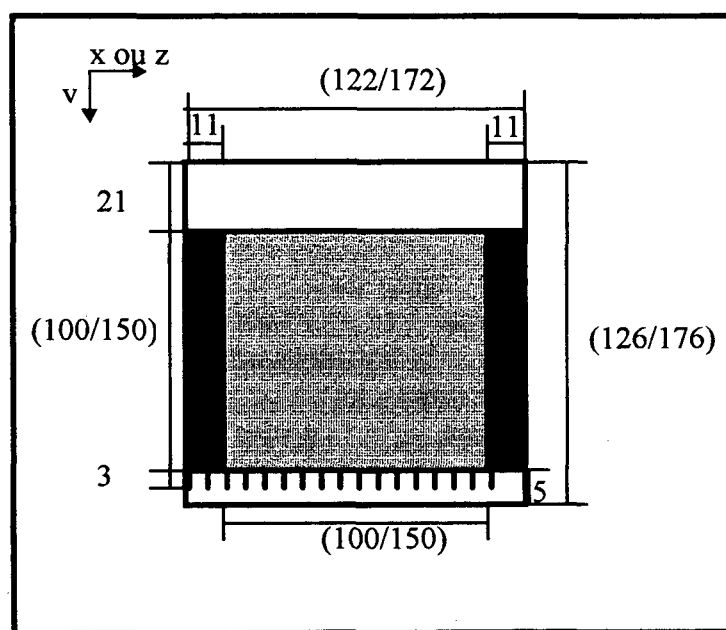


Figura 5.11 - Sistema em que a intrusão do mercúrio se dá por apenas uma face (sistema 1)

Espera-se que o comportamento do meio poroso na superfície seja diferente do comportamento geral deste meio. Por exemplo, espera-se que o volume de mercúrio (em relação à região considerada na amostra) nas proximidades da superfície, no início do processo de intrusão, seja bem maior que o volume de mercúrio no interior do meio poroso. No entanto, se a relação área-volume da amostra possuir um valor pequeno, este volume se torna desprezável.

Esta discrepância dos resultados integrais de volume causadas por uma relação área-volume baixa é chamada de efeito de superfície; espera-se que este efeito não modifique os resultados integrais após a percolação do fluido que invade o meio poroso.

Se a amostra não possui representatividade estatística devido ao seu tamanho, espera-se que os dados de simulação, ou experimentais em amostras deste tamanho apresentem-se com desvios maiores do que os desvios apresentados por amostras maiores. Os desvios causados pela falta de representatividade estatística da amostra é chamado de efeito de tamanho da amostra.

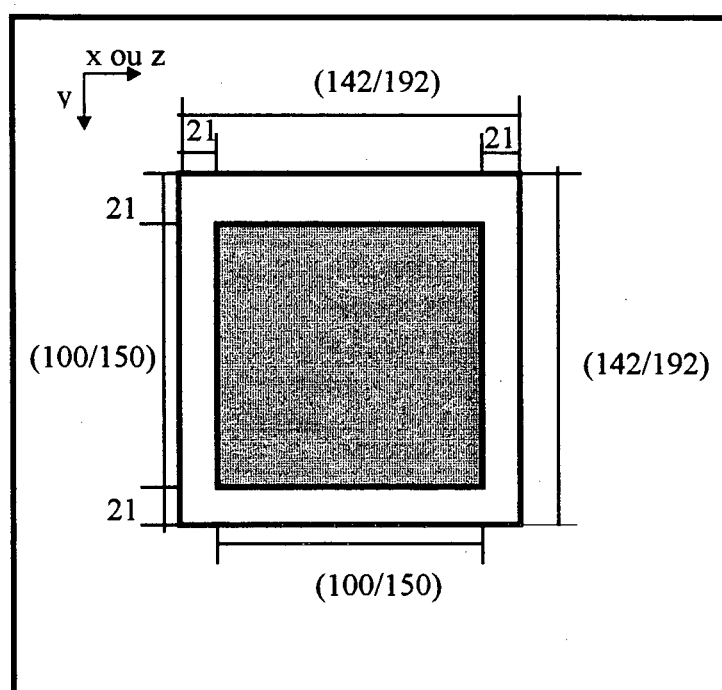


Figura 5.12- Sistema em que a intrusão de mercúrio se dá por todas as faces (sistema 2)

Se a amostra possui uma superfície tal que os poros não possuem representatividade estatística, pode ocorrer um condicionamento dos resultados integrais da amostra mesmo depois do fluido que invade o meio poroso percolar. Este efeito é chamado de condicionamento do meio poroso à superfície.

Resumindo, espera-se que os efeitos de superfície causem modificação nas curvas integrais de volume antes da percolação e que se tornem desprezáveis após esta. Espera-se também que tanto os efeitos de tamanho da amostra como o condicionamento do meio à superfície causem dispersão nas curvas de volume durante todo o processo.

Faz-se agora uma análise dos resultados das simulações de intrusão de mercúrio baseada nestes efeitos expostos acima.

A Figura 5.13 apresenta os resultados da simulação do processo de intrusão de mercúrio utilizando o sistema 1 (intrusão por uma face) e as matrizes (100x100x100) e (150x150x150) como meio poroso. Observa-se que a invasão do mercúrio inicia antes nas matrizes (150x150x150), que a dispersão das curvas utilizando as matrizes (100x100x100) é menor e que antes da percolação o patamar de volume é próximo ao valor 0 para todas as matrizes. Nestes gráficos, utiliza-se o termo patamar significando uma parte razoavelmente horizontal de uma determinada curva.

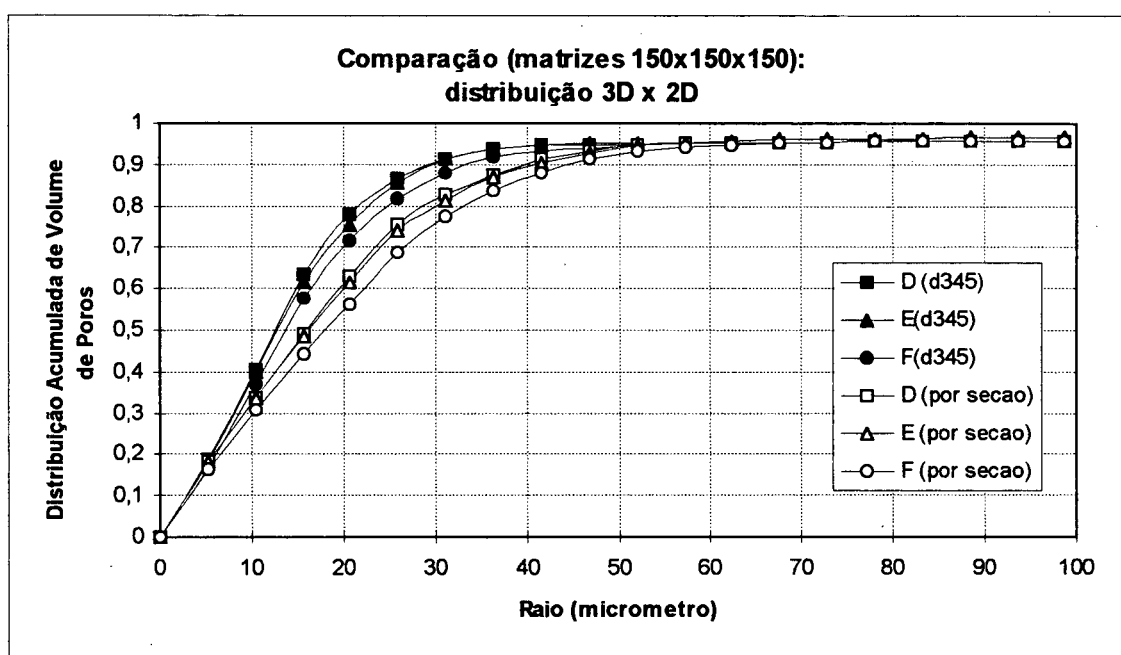


Figura 5.13- Comparação entre as matrizes (100x100x100) e (150x150x150) utilizando as curvas de volume de mercúrio no sistema 1 (intrusão por uma face)

O fato de que no patamar o volume ser próximo a 0 significa que os efeitos de superfície não são representativos. O fato da dispersão ser menor utilizando-se as matrizes menores pode ser explicado pela grande presença em volume de poros de raios inferiores ou iguais a 3 (aproximadamente 50%). Ao comparar-se, para análise qualitativa, o meio poroso e a superfície do meio poroso a redes de percolação, pode-se aproximar o meio poroso por uma rede cúbica e a superfície por uma rede quadrada. Sabe-se, da teoria da percolação, que a percolação se dá antes para redes cúbicas que para redes quadradas (devido a maior conectividade dos objetos). Portanto, no caso das matrizes (100x100x100) acredita-se que, pelo fato da área da superfície ser menor, existe um condicionamento do meio poroso à superfície maior que no caso das matrizes

(150x150x150). Uma vez que a maior parte dos poros possui raio inferior ou igual a 3 células elementares, espera-se que a superfície condicione a percolação do meio como um todo em função destes raios, mas com o comportamento de uma rede bidimensional, e não tridimensional, como o meio poroso como um todo. Desta forma, mascarando a dispersão causada por efeito de tamanho, que deve ser maior para as matrizes menores.

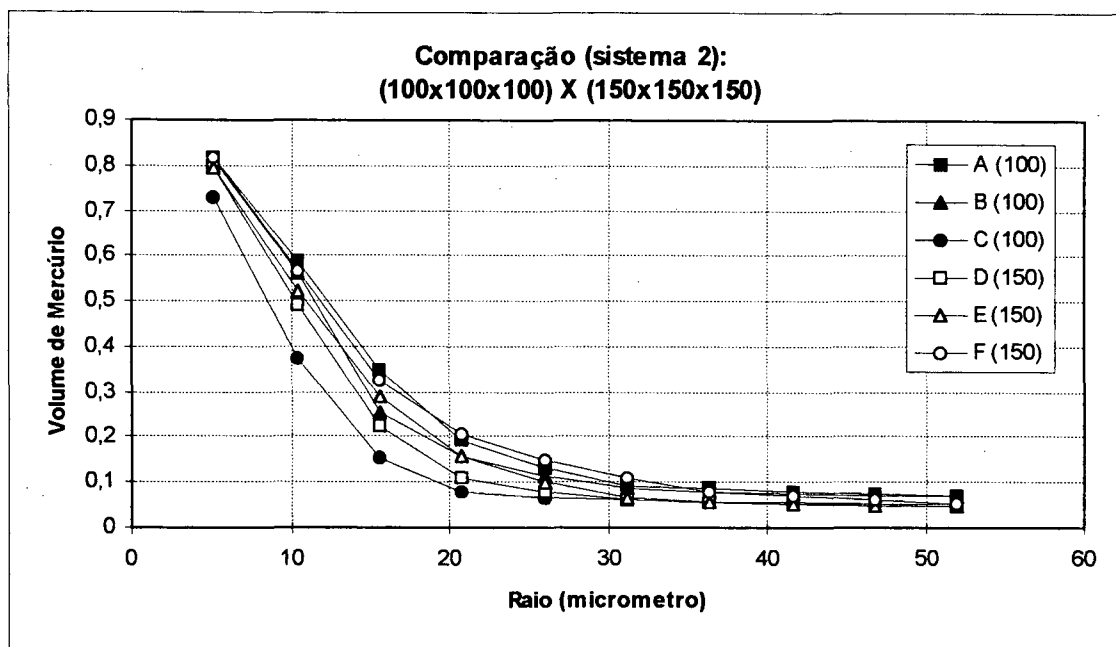


Figura 5.14- Comparação entre as matrizes (100x100x100) e (150x150x150) utilizando as curvas de volume de mercúrio no sistema 2 (intrusão por todas as faces)

A Figura 5.14 apresenta os resultados das simulações dos processos de intrusão de mercúrio utilizando o sistema 2 (intrusão por todas as faces) para todas as matrizes. O volume expresso neste e nos próximos gráficos é a razão entre o volume de fluido que adentrou o meio poroso e o volume das cavidades. Nota-se, nesta figura, que não existe uma preferência pelo início da percolação nem nas matrizes menores nem nas maiores, que a dispersão é maior para as matrizes (100x100x100) e que o patamar de volume anterior à percolação é diferente de 0 para todas as matrizes. Outra característica deste e dos próximos gráficos é que somente existem dados das simulações para valores superiores a 5,2 micrometros. Isto se dá porque a célula elementar utilizada no meio reconstruído possui como valor de dimensão linear 5,2 micrometros, o que torna impossível a simulação abaixo deste valor de raio. O fato dos dados simulados

possuírem sempre valores de volume inferiores a 1 é creditado a cavidades isoladas das câmaras e à rugosidade do meio poroso.

Neste caso, acredita-se que o condicionamento à superfície é mais fraco que nos casos em que utilizou-se o sistema em que a intrusão se dava por apenas uma face. Isto explica a maior dispersão para as matrizes menores, apenas por efeito de tamanho. O patamar existe porque, neste caso o efeito de superfície é mais forte, uma vez que a área da superfície do meio poroso é seis vezes maior que no sistema 1. No entanto, este tipo de efeito de superfície, sem condicionamento do meio à superfície, provoca apenas um deslocamento sistemático que pode ser corrigido numericamente. Nestes casos simulados, a maior contribuição a este deslocamento vertical nas curvas é causada pelo acomodamento do mercúrio aos poros na superfície, e ocorre apenas porque considera-se o meio poroso como um cubo, e não dependente das configurações de equilíbrio.

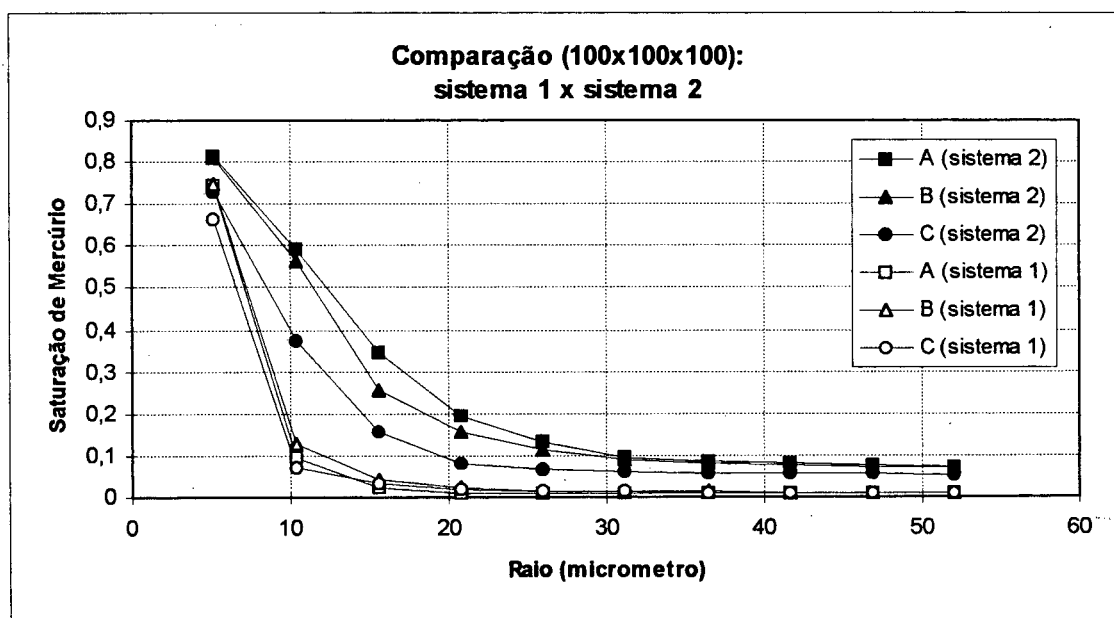


Figura 5.15- Comparação entre os sistemas 1 (intrusão por uma face) e 2 (intrusão por todas as faces) para as matrizes (100x100x100)

A Figura 5.15 apresenta os resultados das simulações de intrusão de mercúrio utilizando as matrizes (100x100x100) como meio poroso para os dois sistemas (intrusão por uma e todas as faces). Nota-se, nestas figuras, a percolação anterior no sistema 2 (intrusão por todas as faces), uma maior dispersão nas curvas no sistema 2 e diferença nos valores de volume nos patamares entre os dois sistemas.

Os patamares, como explicados acima, são causados pelos efeitos de superfície, e não implicam grandes preocupações. A menor dispersão utilizando o sistema 1 se dá, como exposto acima, provavelmente devido ao condicionamento do meio à superfície, mascarando o comportamento do meio poroso. Isto também faz com que a percolação seja atrasada.

A Figura 5.16 apresenta os resultados das simulações de intrusão de mercúrio utilizando as matrizes (150x150x150) como meio poroso para os dois sistemas (intrusão por uma e todas as faces). Nota-se, nesta figura, o valor de volume no patamar diferente para os dois sistemas. Uma vez que a dispersão neste caso é igual para os dois sistemas, acredita-se que esta seja causada apenas por efeito de tamanho das matrizes.

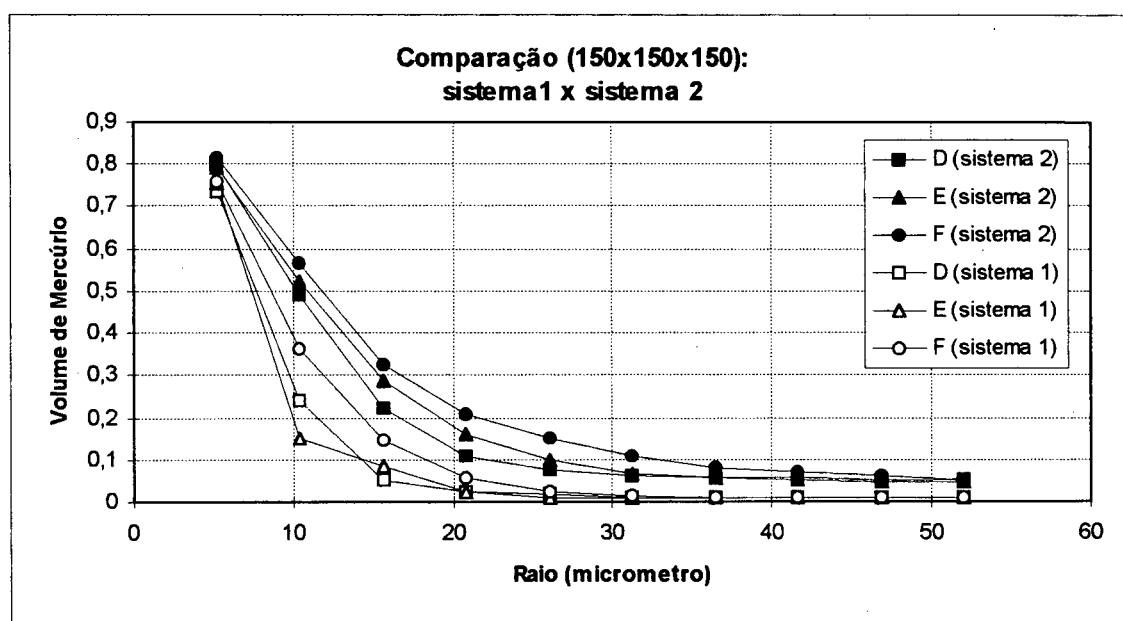


Figura 5.16- Comparação entre os sistemas 1 (intrusão por uma face) e 2 (intrusão por todas as faces) para as matrizes (150x150x150)

A Figura 5.17 apresenta a comparação entre os resultados experimentais e os resultados das simulações. A discrepância entre os resultados das simulações e os resultados experimentais pode ser explicada pelo efeito de tamanho das matrizes e porque pode estar havendo, de maneira mais ou menos forte, dependendo do sistema e do tamanho do meio, condicionamento do meio à superfície. Nota-se que a percolação ocorre mais tarde nas matrizes reconstruídas. Isto é esperado uma vez que o processo de reconstrução resultou em meios porosos com maior frequência de poros menores. Nota-se ainda que a discrepância entre os dados simulados e a curva experimental

se dá em apenas um ponto. A ausência de mais pontos na curva experimental, detalhando a percolação, dificulta maiores comparações.

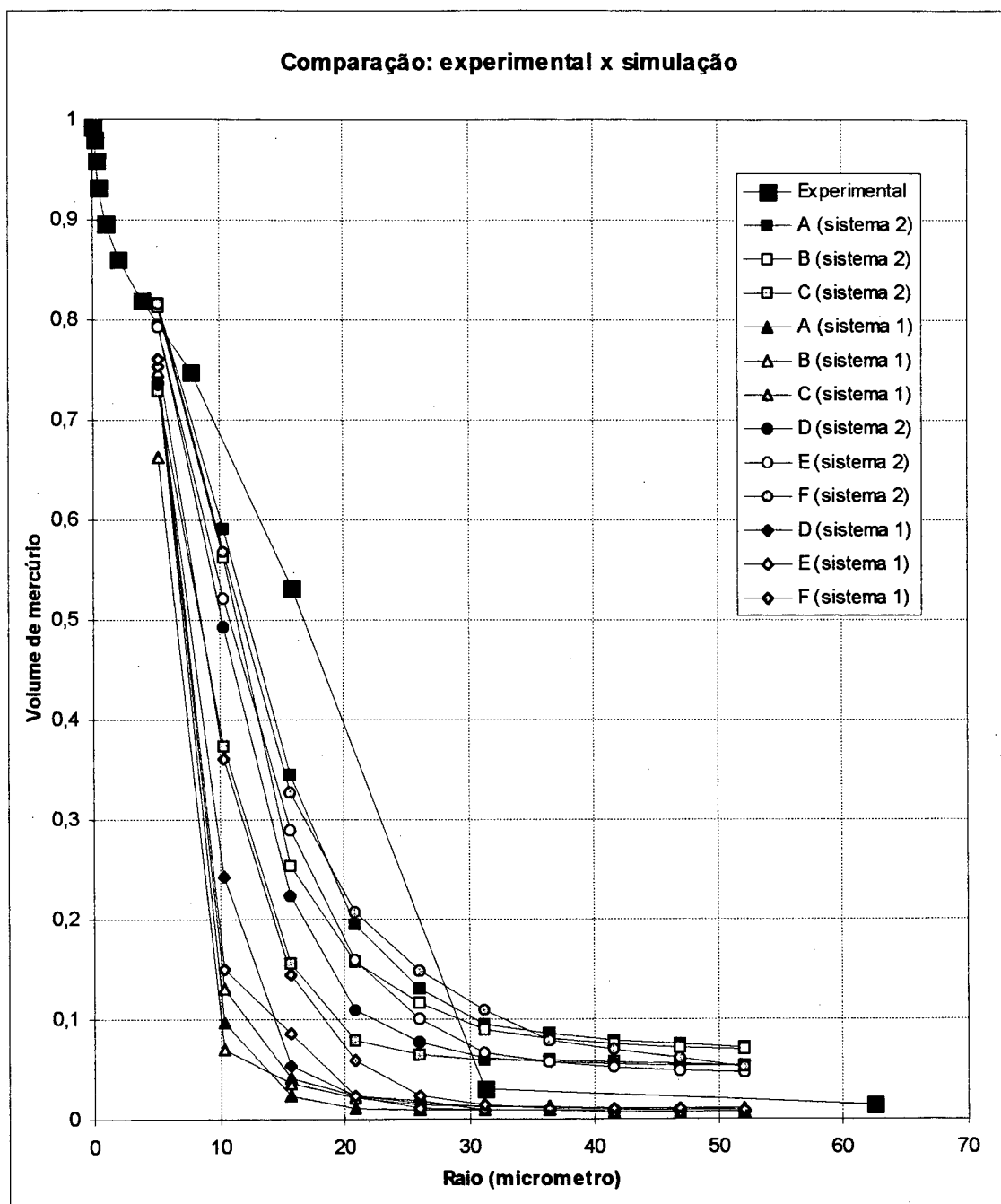


Figura 5.17- Comparação entre os resultados das simulações e os resultados experimentais

Convém também notar que os dados simulados correspondem à expectativa, uma vez que as curvas simuladas apresentam percolação tardia em relação à curva experimental. Isto é

esperado, uma vez que a distribuição de volume de poros do meio reconstruído apresenta uma frequência maior de poros pequenos.

5.6- SIMULAÇÃO DE EMBEBIÇÃO

Nesta seção, apresentam-se os resultados das simulações de invasão de um fluido molhante em um meio poroso preenchido por um fluido não-molhante idealmente incompressível, ou um processo de embebição, por exemplo de água em um meio preenchido inicialmente por óleo.

Para visualizar as configurações em um processo de embebição, nas Figuras 5.18 e 5.19 são apresentadas 10 seções de um sistema tridimensional (onde a matriz sólida do meio poroso é a união de bolas de raio 10), com as suas configurações de equilíbrio para $r=1$ e $r=3$. Neste exemplo $n_x=n_y=n_z=100$. As figuras representam as configurações para um processo de invasão de um fluido molhante em um meio preenchido inicialmente com um fluido não-molhante idealmente incompressível, por exemplo um processo de embebição de água num meio preenchido por óleo. A região vermelha representa o óleo, a região azul representa a água e a região amarela representa o óleo isolado das câmaras. As principais informações que podem ser extraídas destas figuras são o fato da membrana realmente, como esperado, impedir que o óleo adentre a câmara inferior e o fato da água caminhar pelas rugosidades e poros pequenos, isolando boa parte do óleo.

Deste modo, a presença de fluido molhante, na região 1 (Figura 5.18(b)), isolando o fluido não-molhante em 2 (Figura 5.18(b)), se deu graças a um processo de migração de fluido molhante através dos “cantos” ou “rugosidades” das cavidades. De fato, não se trata aqui de um deslocamento tipo pistão, com o fluido molhante preenchendo completamente as cavidades a que tem acesso. Esse tipo de migração não pode ser satisfatoriamente previsto utilizando, por exemplo, redes de percolação para a simulação de processos de invasão, sobretudo quando se trata de redes constituídas por elementos cilíndricos (ligações) e esféricos (sítios). Ainda que admitindo esse tipo de migração, redes de percolação constituídas por paralelepípedos, Lenormand et alii (1983), dificilmente conseguem representar corretamente as conexões tridimensionais entre os “cantos” das cavidades.

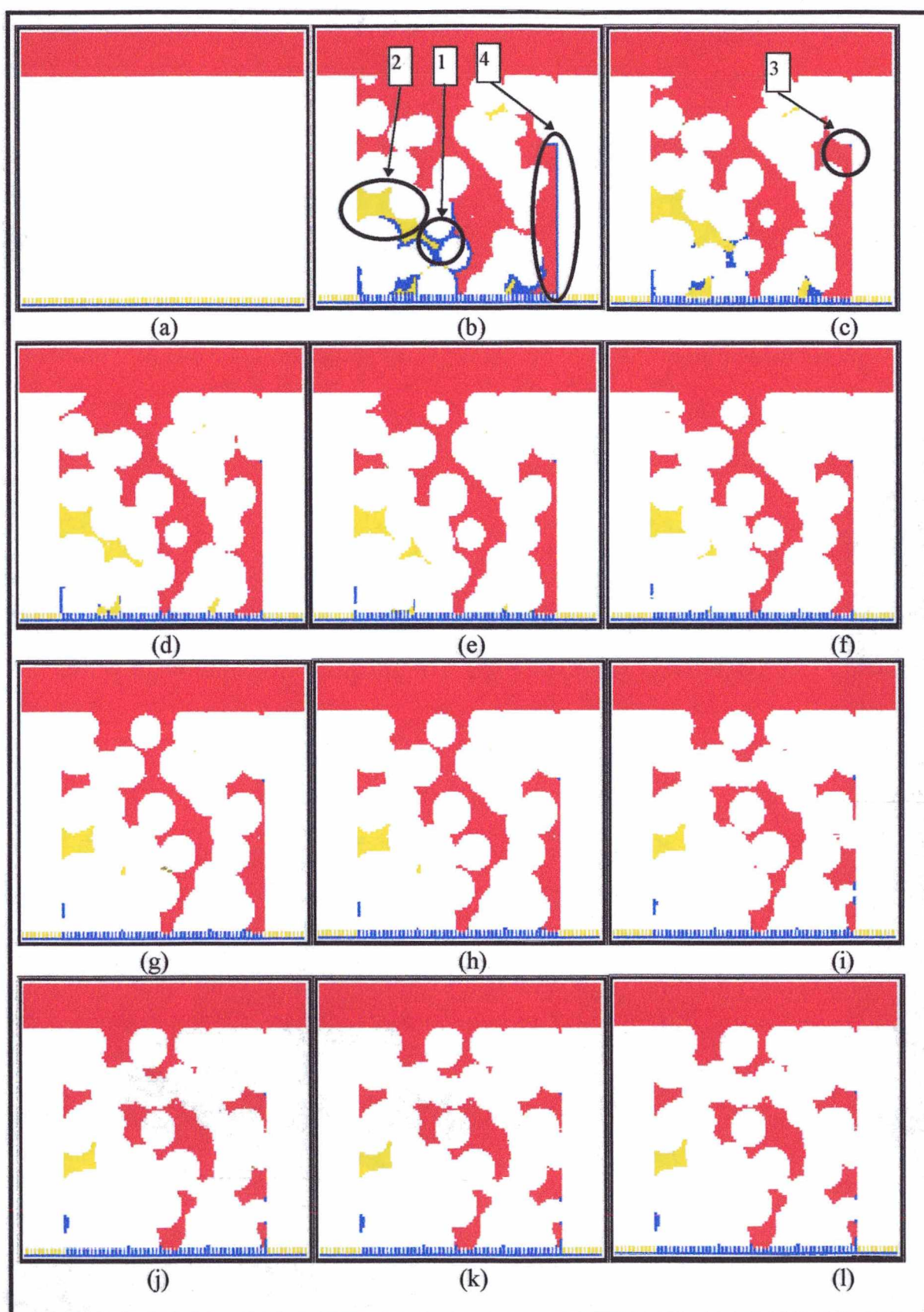


Figura 5.18 - Seções de um sistema em um processo de embebição ($r=1$). Branco representa o sólido, azul representa a água, vermelho representa o óleo conectado às câmaras e o amarelo representa o óleo isolado das câmaras

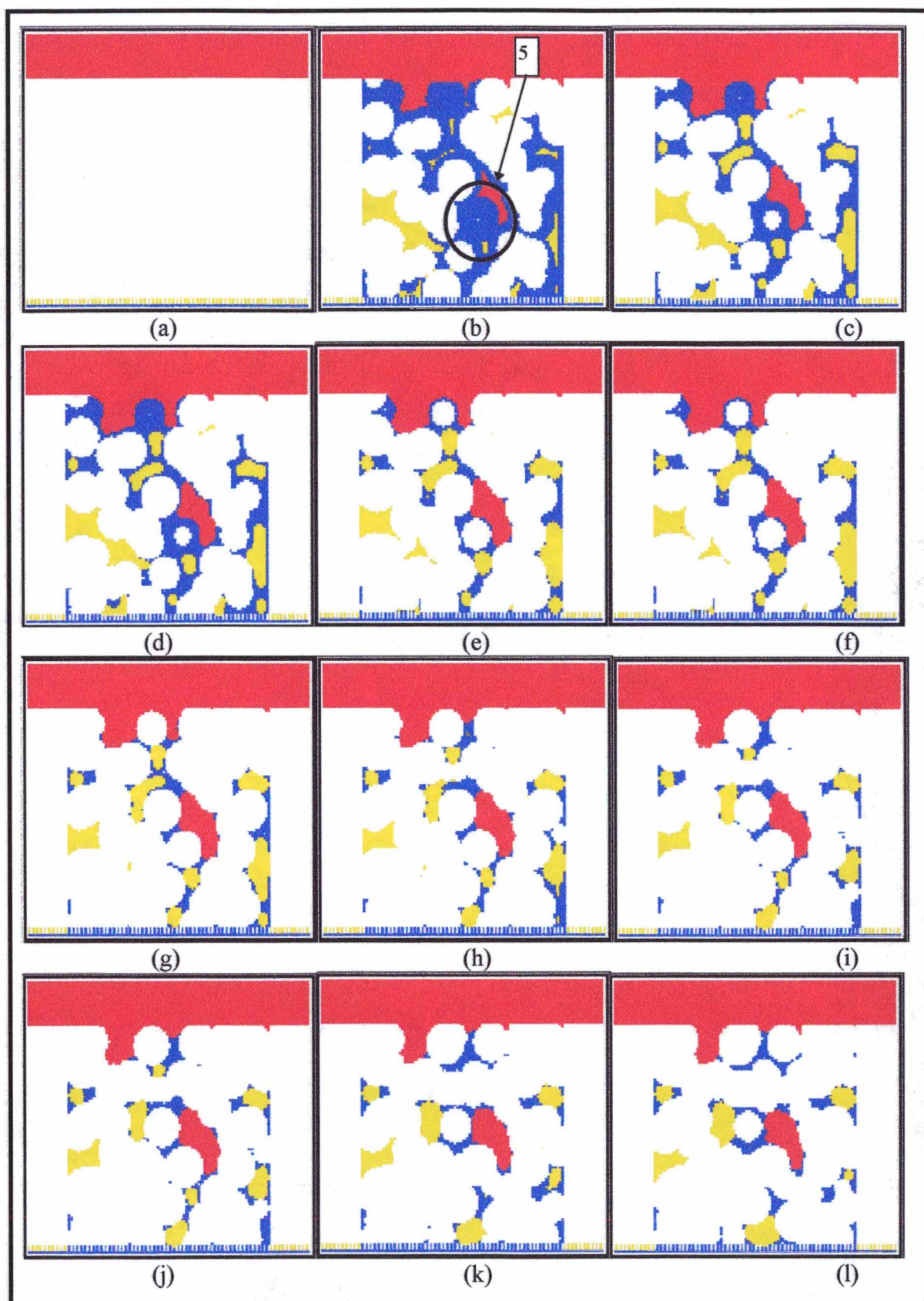


Figura 5.19 - Seções de um sistema em um processo de embebição ($r=3$). Branco representa o sólido, azul representa a água, vermelho representa o óleo conectado às câmaras e o amarelo representa o óleo isolado das câmaras

Esta migração do fluido molhante pelas paredes acontece apenas em geometrias tridimensionais. Imagine, por exemplo, um poro cúbico de lado $2L$; quando se determina a região verde complementar para $r^i \leq L$, observa-se que esta região é completamente conectada. Já no caso bidimensional, um quadrado de lado $2L$, a região verde complementar é desconectada, apresentando quatro componentes conexas nos cantos.

Outros aspectos interessantes nas Figuras 5.18 e 5.19 são que, por exemplo na região 3 (Figura 5.18(c)) aparentemente existe uma célula elementar azul (fluido molhante) desconectada das câmaras. Pode-se observar, no entanto, que esta célula está conectada às câmaras pela região 4 (Figura 5.18(b)). Na região 5 (Figura 5.19(b)), aparentemente o raio de curvatura da interface repousa no fluido molhante, quando deveria repousar no fluido não-molhante. No entanto, deve-se observar que a interface é tridimensional e que quando compõem-se as seções para se formar a imagem tridimensional, o raio de curvatura repousa no fluido não-molhante.

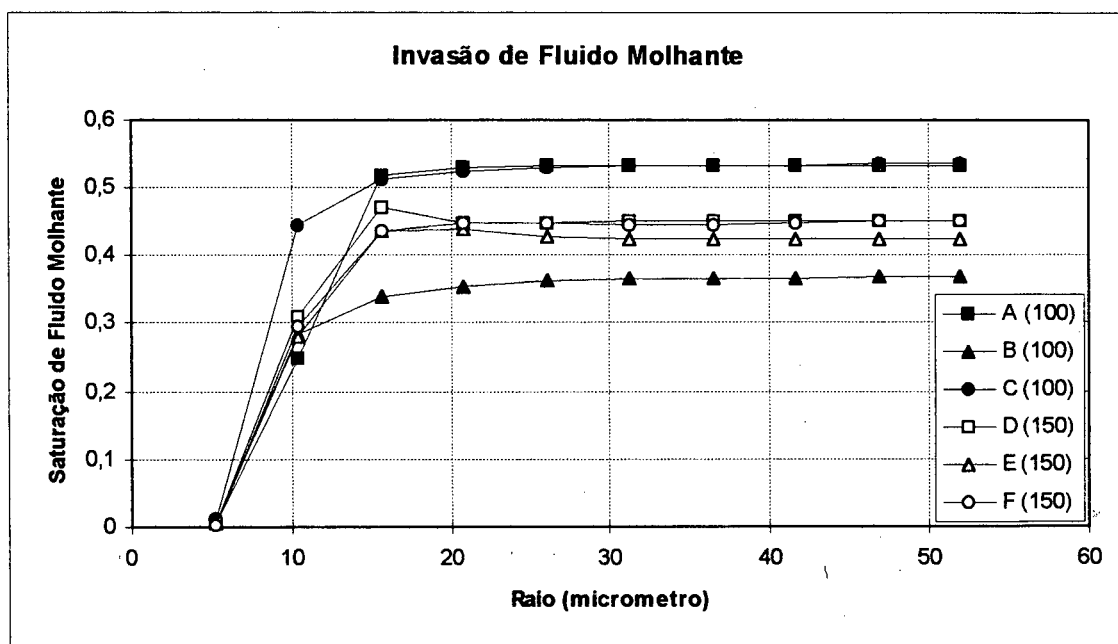


Figura 5.20- Embebição de um fluido molhante

Não se possui, no momento e local de desenvolvimento desta análise, dados de embebição de um fluido molhante em um meio poroso inicialmente preenchido por um fluido não-molhante e idealmente incompressível, como por exemplo um sistema água-óleo. Portanto, faz-se apenas uma análise qualitativa. A Figura 5.20 apresenta o resultado da simulação de um processo desse tipo utilizando o sistema 1 (invasão por uma face). Para um raio igual a 2 células (10,4 micrometros),

o volume para a matriz C é superior aos volumes para as simulações utilizando as matrizes A e B. Este comportamento advém do fato de que a matriz C possui mais poros de raio igual a 1 célula elementar. O volume máximo de fluido molhante para as simulações utilizando as matrizes A e C é bastante superior ao volume alcançado para a matriz B. Provavelmente, este comportamento se deve a efeitos de tamanho, os quais, espera-se, aumentem a dispersão. Pode-se observar ainda que a dispersão para as matrizes (150x150x150) é menor que a dispersão para as matrizes (100x100x100). A curva para a matriz D apresenta um valor maior de volume para um raio igual a 3 células que para os raios maiores do que 3 células. Como visto no capítulo anterior, a utilização das bolas em um espaço discreto pode provocar este comportamento, dependendo da geometria.

5.7- SIMULAÇÃO DE INVASÃO

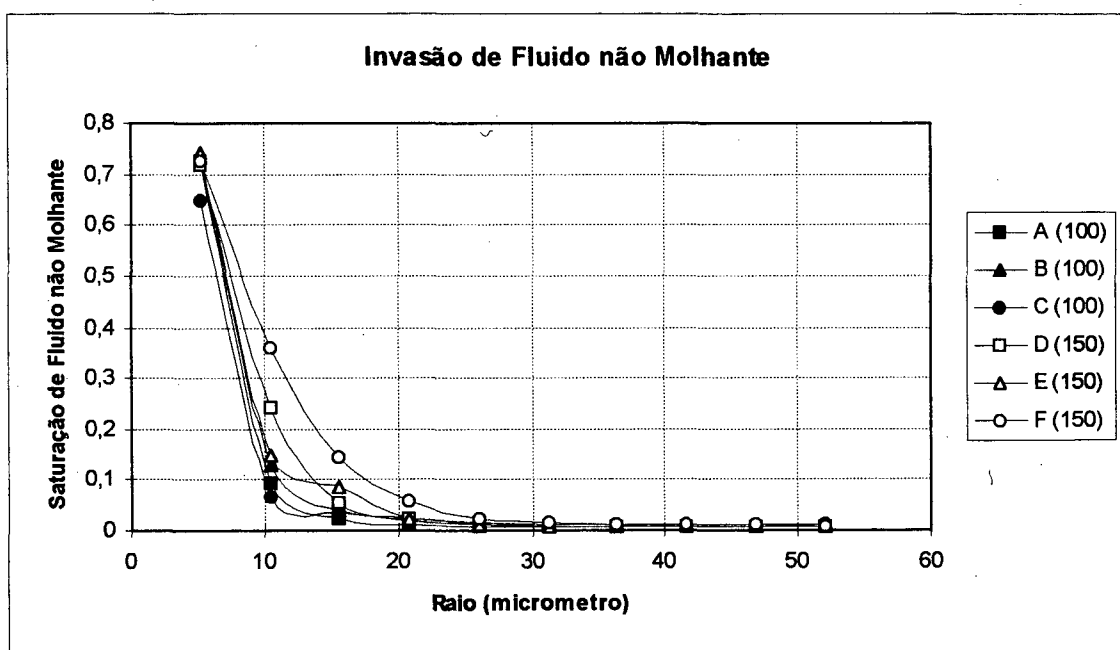


Figura 5.21- Invasão de fluido não molhante

Também por não se possuírem dados, esta seção apresenta apenas uma análise qualitativa dos dados oriundos da simulação de um processo de invasão de um fluido não-molhante em um meio poroso preenchido inicialmente por um fluido molhante idealmente incompressível. A Figura 5.21 apresenta estes dados para a simulação utilizando o sistema 1 (invasão por uma face). Quando se assume que o fluido molhante sempre possui conectividade às câmaras pela rugosidade

dos poros, podem-se utilizar os dados de intrusão de mercúrio como resultado deste processo de invasão. A comparação entre este dois processos, em que a água sempre possui conectividade e do processo em que a conectividade da água é dependente da geometria é apresentada na Figura 5.22 e 5.23. Pode-se observar, nessas figuras, que os dados concordam muito bem entre si. Ou seja, a hipótese de que o fluido molhante sempre está conectado às câmaras aparentemente é bastante adequada, ao menos para os casos analisados.

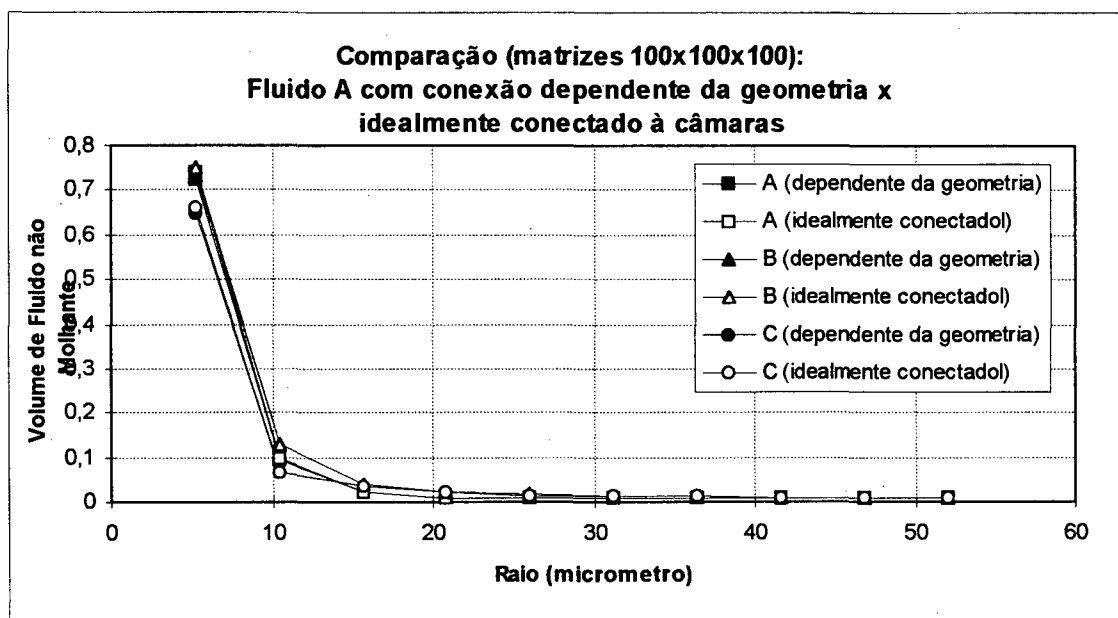


Figura 5.22- Comparação dos resultados da simulação do processo de invasão de fluido não molhante considerando a conectividade do fluido molhante como consequência da geometria (incompressível) e considerando a conectividade do fluido molhante como existente à priori (compressível) utilizando como meio poroso as matrizes (100x100x100)

O volume residual de fluido molhante em um processo de invasão por um fluido não-molhante independe da forma como os poros estão conectados espacialmente. O fluido molhante é extraído pelos “cantos” (rugosidades) das paredes dos poros, formando uma fase conectada, até o final do processo de extração.

Desse modo, a eficiência de extração é bastante superior quando comparada com o processo de invasão com um fluido molhante. Nesse último caso, o mecanismo migração do fluido molhante através dos “cantos” dos poros faz com que um grande número de clusters de fluido não-molhante isolados se formem durante o processo permanecendo isolados até o final da

extração. A extração fica condicionada à forma como os poros maiores, contendo o fluido não-molhante, estão conectados espacialmente à superfície.

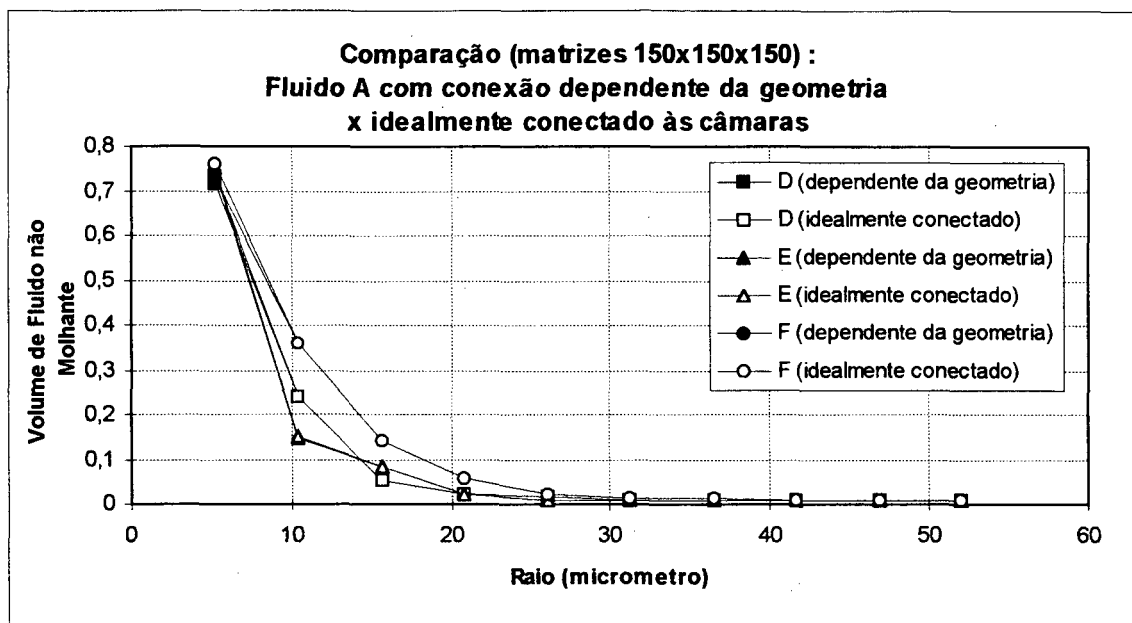


Figura 5.23- Comparação dos resultados da simulação do processo de invasão de fluido não molhante considerando a conectividade do fluido molhante como consequência da geometria (incompressível) e considerando a conectividade do fluido molhante como existente à priori (compressível) utilizando como meio poroso as matrizes (150x150x150)

5.8- COMENTÁRIOS FINAIS SOBRE A SIMULAÇÃO

Dos resultados das simulações e avaliações dos parâmetros geométricos de interesse do meio poroso, podem-se resumir os fatos e hipóteses assumidas mais importantes.

A maneira como o meio foi reconstruído não proporcionou matrizes com a mesma distribuição de volume de poros que a amostra. Isto pode ter sido provocado pela escolha de uma célula elementar com o dobro da dimensão linear dos pixels da amostra ou por insuficiência do método de reconstrução de Joshi. Acreditamos que a primeira hipótese seja a mais próxima da realidade. Uma forma de se avaliar esta hipótese seria reconstruir o meio poroso utilizando células elementares com a mesma dimensão linear dos pixels. No entanto, para as máquinas e o método utilizado neste trabalho, isto é inviável em termos de tempo de processamento. Se, ao invés de se utilizar o filtro linear que consome a maior parte do processamento, utilizar-se transformada de Fourier, o problema passa a ser capacidade de armazenamento. Ioannidis, Kwiecien e Chatzis

(1995) propuseram um método híbrido que contrabalança estes dois fatores na reconstrução, tornando-a factível.

A comparação dos resultados de distribuição de volume, utilizando as métricas euclidianas bi e tridimensionais e as métricas de chanfro d_{34} e d_{345} apresentou uma ótima concordância. Este fato verifica a hipótese de que estas métricas de chanfro, que ocupam menos memória e tempo de processamento podem ser utilizadas com erros totalmente aceitáveis.

A análise qualitativa dos resultados das simulações de intrusão de mercúrio demonstrou que as amostras não eram satisfatoriamente grandes para estas simulações. Acredita-se que o fato da dispersão não possuir a sua média próxima aos dados experimentais é devido à reconstrução imperfeita do meio em relação à distribuição de volume de poros.

Das simulações de invasão de fluido molhante e não-molhante observou-se que o fluido molhante, quando invadindo o meio, basicamente movimenta-se pelas rugosidades do meio, e não com um movimento tipo pistão. Esta característica do deslocamento da frente molhante faz com que o fluido molhante consiga extrair 30% a menos de fluido que no caso de invasão de fluido não molhante. Observou-se ainda que a hipótese do fluido molhante, na invasão de um fluido não-molhante, estar conectado necessariamente (sem dependência da geometria) às câmaras, é uma boa hipótese, ao menos para o meio reconstruído e a técnica utilizados.

CAPÍTULO 6 - CONCLUSÃO

Em vista dos dados obtidos por meio das simulações, observou-se uma forte dependência destes ao tamanho das amostras, o que pode ser visto quando se analisa a dispersão das curvas. Esta limitação não pôde ser contornada, uma vez que o método utilizado para a reconstrução do meio poroso utiliza grande capacidade de máquina, tanto em memória como em tempo de processamento.

O método de reconstrução de Joshi, como utilizado neste trabalho, mantém a porosidade e a função covariograma, mas não mantém a distribuição de volume de poros. Este fato pode advir tanto de uma fraca relação entre o covariograma e a distribuição de volume de poros, de uma forte sensibilidade da distribuição de volume de poros ao covariograma, ou ainda, o que julgamos mais provável, da distribuição de volume de poros não ter sido mantida pelo fato da célula elementar das matrizes reconstruídas possuírem dimensão linear duas vezes maior que a dimensão linear das células elementares da amostra. Mais uma vez, esta limitação não pôde ser contornada devido ao método de reconstrução de Joshi.

O fato da distribuição de volume de poros não corresponder à distribuição da amostra, possuindo maior frequência de poros menores, provocou percolação tardia nas curvas simuladas, no processo de intrusão, em relação à curva experimental. Utilizando a expectativa prévia, a partir do comportamento qualitativo dos resultados utilizando redes de percolação, pode-se concluir que esta diferença, na região de percolação, se dá fundamentalmente pela incapacidade do método de Joshi (e das limitações impostas a este método, neste trabalho, devido à incapacidade computacional) de reconstruir a distribuição de poros, e não da utilização de apenas uma amostra. Ainda, comparando os dados simulados com os experimentais, pode-se observar que apenas um ponto experimental saiu da média das curvas simuladas, justamente na região de percolação.

As duas conclusões mais importantes, sob o ponto de vista tecnológico, obtidos da análise qualitativa das curvas simuladas são: na invasão de um fluido molhante, o volume residual é aproximadamente 30% maior que na invasão de um fluido não molhante e as curvas de volume de fluido não molhante invadido, tanto utilizando conectividade ideal do fluido molhante as câmaras como utilizando conectividade dependente da geometria, são extremamente parecidas. Da primeira conclusão, nasce uma perspectiva tecnológica na extração de fluidos do interior de meios porosos, transformando, por alterações químicas ou biológicas, o fluido invasor em um fluido não molhante, o que permite maior extração, isto é, menor volume residual. Da segunda conclusão, surge uma forte evidência de que a utilização da hipótese de conectividade ideal às câmaras não é distante da realidade. Esta evidência permite a utilização confiável desta hipótese em modelos mais simples, como os modelos de rede, ou ainda em uma menor utilização de capacidade computacional pelo método utilizado neste trabalho.

A seguir, são expostas propostas para trabalhos futuros, em vista das limitações deste trabalho e de suas conclusões. Como visto no capítulo anterior, e exposto acima, pode-se notar a forte dependência dos dados obtidos ao tamanho da amostra e da não concordância entre a distribuição de volume de poros da matriz reconstruída e da amostra. Este fato implica a necessidade de uma melhor reconstrução, ainda mantendo apenas a porosidade e o covariograma, analisando desta forma se esta discrepância e a dispersão das curvas são realmente decorrentes da maneira como o meio foi reconstruído, ou se o método, mantendo o covariograma e a porosidade é inadequado para reconstruir meios porosos com vistas à simulação de processos.

Embora o efeito da simplificação das interfaces, forçando-as a serem esféricas, não tenha sido analisada, percebe-se a necessidade de um estudo mais profundo do fenômeno de estabilidade local das interfaces, incluindo nestes mais detalhes, como a interação entre os fluidos e a matriz sólida e a gravidade. Desta forma, pode-se concluir se a hipótese da esfericidade das interfaces está ou não distante da realidade. Caso se chegue a conclusão de que esta hipótese não é adequada, nasce a necessidade de uma solução, e conseqüentemente de técnicas para a obtenção de resultados, em que estas interfaces não esféricas possam ser obtidas. Isto pode ser feito utilizando, na operação de abertura, ao invés de bolas, elementos estruturantes outros como elipsóides, por exemplo.

A partir da determinação das configurações de equilíbrio, podem-se utilizar estas informações como as condições de contorno para a simulação de processos dinâmicos, fluxo mássico de fluidos, em regime permanente. Isto pode ser feito aplicando diretamente a equação de Navier-Stokes nas regiões fluido A e fluido B ou ainda utilizando técnicas de esqueletização para a obtenção das direções preferenciais de fluxo e da seção transversal. A utilização da equação de Navier-Stokes em meios porosos reconstruídos certamente utiliza grande capacidade computacional, no entanto apresenta-se como uma técnica muito importante na validação dos resultados obtidos por meio da esqueletização, em geometria reduzidas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADAMSON, A.W., **Physical Chemistry of Surfaces**. New York, John Willey & Sons, 1982.

ADLER, P.M.; JACQUIN, C.G.; QUIBLIER, J.A. Flow in Simulated Porous Media. **Int J. Multiphase Flow**, v.16, pp.691-712, 1990.

BLUNT, M.; KING, P. Permeabilities from Two- and Three-Dimensional Pore-Scale Network Modelling. **Transport in Porous Media**. v.6, n.4, pp.407-434, 1991.

BRUNAUER, S.; EMMET, P.H.; TELLER, E. Adsorption of Gases in Multimolecular Layers. **J. Amer. Chem. Soc.** v.60, pp.309, 1938.

COHAN, L.H. Sorption Hysteresis and the Vapor Pressure of Concave Surfaces. **Journal of the American Chemical Society**. v.60, n.2, pp.433-435, 1938.

DAIAN, J.F. From Pore-Size Distribution to Moisture Transport Properties: Particular Problems for Large Pore-Size Distributions. **IDS'92. 8th Int. Drying Symp. Montréal**, 1992.

DELFINER, P. ÉTIENNE, J., FONCK, J.M. Application de l'Analyseur de Textures a l'Étude Morphologique des Réseaux Poreux em Lames Mices. **Revue de l'Institut Français du Pétrole XXVII**. n.4, pp.535-558, 1972.

EVERETT, D.H.; HAYNES, J.M. Model Studies of Capillary Condensation. I. Cylindrical Pore Model with Zero Contact Angle. **Journal of Colloid and Interface Science**. v.38, n.1, pp.125-137, 1972.

FERNANDES, C.P. Caracterização Morfotopológica de Espaços Porosos: Reconstituição Multiescala e Simulação de Processos de Invasão de Fluidos não Molhantes. **Tese de Doutorado** defendida do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, 1994.

FERNANDES, C.P.; MAGNANI, F.S., PHILIPPI, P.C.; DAIAN, J.F. Multi-Scale Geometrical Reconstitution of Porous Structures. (**submitted to Physical Review E**, 1996).

GAUGLITZ, P.A.; RADKE, C.J. An Extended Evolution Equation for Liquid Film Breakup in Cylindrical Capillaries. **Chemical Engineering Science**. v.43, n.7, pp.1457-1465, 1988.

HOSHEN, J.; KOPELMAN R. Percolation and Cluster Distribution. I. Cluster Multiple Labeling Technique and Critical Concentration Algorithm. **Physical Review B**. v.14, n.8, pp.3438-3445, 1976.

IOANNIDIS, M.; KWIECIEN, M.; CHATZIS, I. Computer Generation and Application of a 3-D Model Porous Media: From Pore-Level Geostatistics to the Estimation of Formation Factor. **Petroleum Computer Conference**, Houston, 1995.

KIRKPATRICK, S. Percolation and Conduction. **Reviews of Modern Physics**. v.45, n.4, pp.574-588, 1973.

LANGMUIR, I. The Adsorption of Gases on Plane Surfaces of Glass, Mica and Platinum. **J. Amer. Chem. Soc.** v.40, pp.1361-1403, 1918.

LENORMAND, R.; ZARCONI, C.; SARR, A. Mechanisms of the Displacement of one Fluid by another in a Network of Capillary Ducts. **J. Fluid Mech.** V.135, pp.337-353, 1983.

MASON, G.; MORROW, N. Meniscus Displacement Curvatures of a Perfectly Wetting Liquid in Capillary Pore Throats Formed by Spheres. **Journal of Colloid and Interface Science**. v.109, n.1, pp.46-56, 1986.

MASON, G.; MORROW, N. Meniscus Configurations and Curvatures in Non-Axisymmetric Pores of Open and Closed Uniform Cross Section. **Proc. R. Soc. Lond. A** 414, pp.111-133, 1987.

MOSCHETTO, C. Caractérisation de la Structure Poreuse des Matériaux par Analyse d'Images: Apport des Distances Discrètes à la Morphologie Mathématique. **Rapport de Stage**. Grenoble, 49pp., 1991.

PAPOULIS, A. **Probability, Random Variables , and Stochastic Processes**. McGraw-Hill, 1965.

PARLAR, M.; YORTSOS, Y.C. Percolation Theory of Vapor Adsorption-Desorption Processes in Porous Materials. **Journal of Colloid and Interface Science**. V.124, n.1, pp.162-176, 1988.

PHILIP, J.R.; DE VRIES, D.A. Moisture Movement in Porous Material under Temperature Gradients. **Transactions of the American Geophysical Union**. v.38, n.2, pp.222-232, 1957.

PIERITZ, R.A. Desenvolvimento das Técnicas do Gráfico da Linha Mediana e da Binarização por Regiões Conexas Aplicadas à Caracterização Geométrica de meios Porosos. **Dissertação de Mestrado** defendida no departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina. 1994.

POSADAS, A.D.; CRESTANA S. Teoria "Fractal" e Técnicas de Imagem na Caracterização da Infiltração Instável em um Meio Poroso não Saturado. **XIX Encontro Sobre Escoamento em Meios Porosos**. v.1, pp.117-129, Campinas, 1991.

QUENARD, D.A.; BENTZ D.P. Capillary Condensation, Hysteresis and Image Analysis. **Drying'92**, pp.253-262, 1992.

QUIBLIER, J.A. A New Three-Dimensional Modeling Technique for Studying Porous Media. **Journal of Colloid and Interface Science**. v.98, n.1, pp.84-102, 1984.

SOUZA, H.A. Estudo dos Processos de Fixação e Transferência Isotérmica de Umidade em Meios Porosos Heterogêneos. **Tese de Doutorado** defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, 1993.

THIEL, E. Amélioration des Distances du Chanfrein. Construction de la Ligne Médiane et Décomposition des Formes. **Mémoire de DEA**, Grenoble, Institut de Mécanique de Grenoble, 1991.

TSAKIROGLOU, C.D.; PAYATAKES, A.C. A New Simulator of Mercury Porosimetry for the Characterization of Porous Materials. **Journal of Colloid and Interface Science**. v.137, n.2, pp.315-339, 1990.

XU, K.; DAÏAN, J.F.; QUENARD, D. Multiscale Structures do Describe Porous Media. Part I - Theoretical Background and Invasion by Fluids. (**submitted to Transport in Porous Media**, 1995).

WALL, G.C.; BROWN, J.C. The Determination of Pore-Size Distributions from Sorption Isotherms and Mercury Penetration in Interconnected Pores: The Application of Percolation Theory. **Journal of Colloid and Interface Science**. v.82, n.1, pp.141-149, 1981.

YANG XUEFENG. A Network Approach in Analysis of Mass Transfer at the Interface Between a Fluid and a Capillary Porous Medium, **Tese de Doutorado** defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1995.

APÊNDICE A - ALGORITMOS

A.1- TÉCNICA

Seja C^i uma imagem ternária tridimensional de forma paralelepipedal que respeita os dados do problema geométrico, ou seja, uma matriz tridimensional com dimensões NX, NY e NZ , com todos os elementos da superfície possuindo rótulo 0. O rótulo 0 nesta matriz representa o sólido, o rótulo 2 representa a região amarela, e o rótulo 1 representa os elementos que pertencem à região F e que não pertencem à região amarela, Y^i . $C^i(x,y,z)$ assume o valor do rótulo do elemento (x,y,z) da matriz ternária. A figura 4.4 apresenta um exemplo de matriz ternária bidimensional com $NX=25$ e $NY=13$. Este algoritmo permite a determinação das configurações de equilíbrio utilizando tanto a métrica euclidiana como a métrica d_{345} .

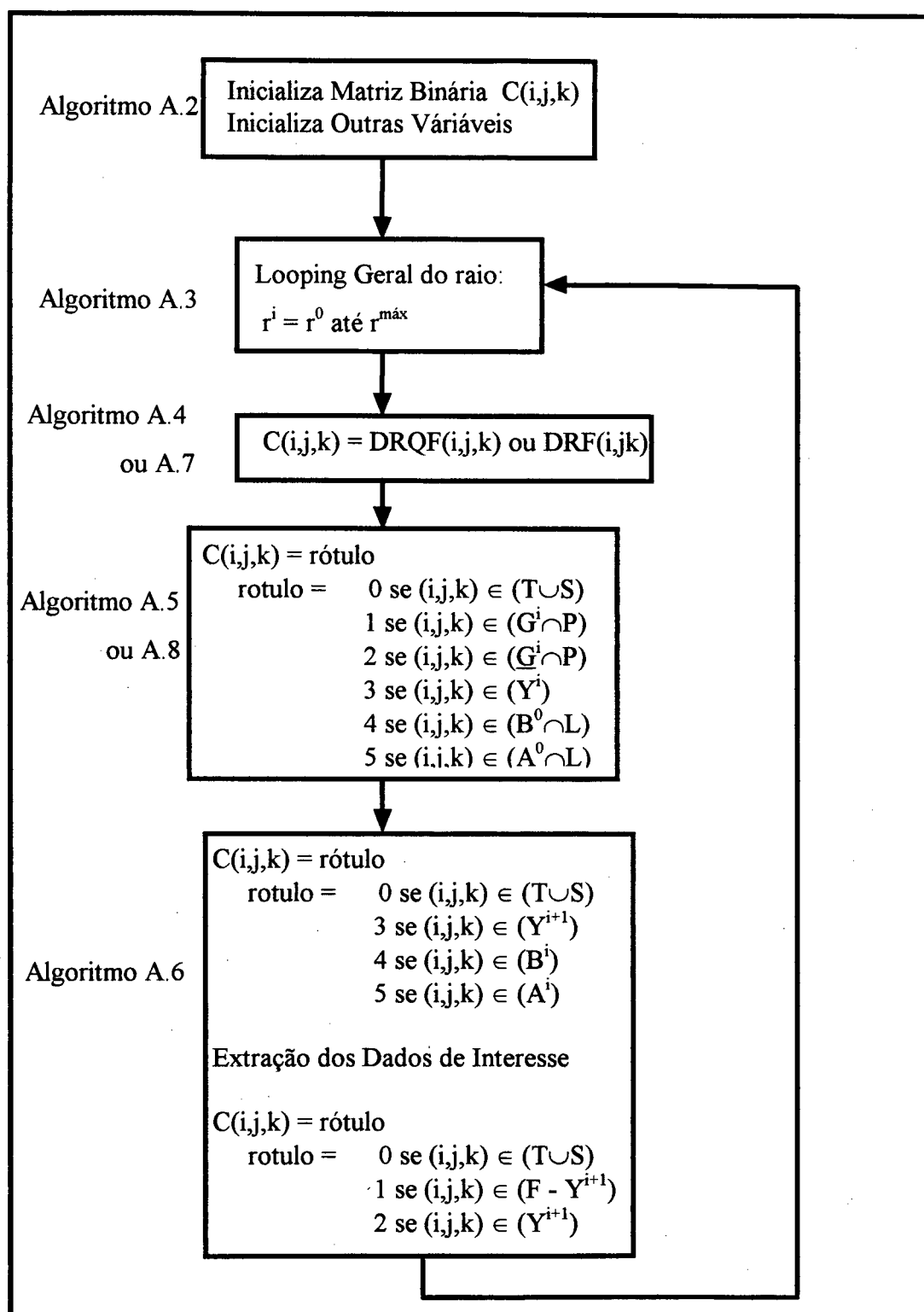


Figura A.1 - Diagrama do Algoritmo

Seja $DQF(C^i(x,y,z))$ a distância ao quadrado do elemento (x,y,z) ao mais próximo elemento deste que possua rótulo 0.

Seja $DRQF(C^i(x,y,z))$ uma transformação no rótulo do elemento (x,y,z) tal que:

$$DRQF(C^i(x,y,z))=DQF(C^i(x,y,z)) \text{ se } C^i(x,y,z)=\{1 \text{ ou } 0\} \quad (A.1)$$

$$DRQF(C^i(x,y,z))=DQF^*(C^i(x,y,z))+MAX \text{ se } C^i(x,y,z)=\{2\} \quad (A.2)$$

Onde $MAX=2^{14}$ se as variáveis que armazenam a matriz ternária forem do tipo “int”

A matriz $DRQF(C^i)$ assim obtida é chamada imagem de distância rotulada (ao quadrado) ao fundo.

Seja $DF(C^i(x,y,z))$ a distância do elemento (x,y,z) ao mais próximo elemento deste que possua rótulo 0, utilizando a métrica d_{345} .

Seja $DRF(C^i(x,y,z))$ uma transformação no rótulo do elemento (x,y,z) tal que:

$$DRF(C^i(x,y,z))=DF(C^i(x,y,z)) \text{ se } C^i(x,y,z)=\{1 \text{ ou } 0\} \quad (A.3)$$

$$DRF(C^i(x,y,z))=DF(C^i(x,y,z))+MAX \text{ se } C^i(x,y,z)=\{2\} \quad (A.4)$$

A matriz assim obtida é chamada de imagem de distância ao fundo rotulada.

O algoritmo pode ser dividido em 5 partes. Estas são apresentadas nas seções A.2-A.6.

Basicamente o algoritmo parte de uma matriz $C(i,j,k)$ que representa o sistema e transforma esta matriz de forma que esta represente as configurações de equilíbrio. Na figura A.1, é apresentado um diagrama que representa o algoritmo proposto. Para facilitar a separação entre o algoritmo propriamente dito e suas respectivas explicações, o algoritmo é apresentado em *itálico*. O texto entre {} nos algoritmos são comentários.

A.2- INICIALIZAÇÃO DE $C(i,j,k)$ e OUTRAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Esta parte do algoritmo é utilizada para inicializar alguns dados que são utilizados na parte restante do algoritmo. Estas variáveis podem se dividir em três tipos: variáveis dimensionais e de processo, variáveis de auxílio dos loopings e matriz $C(i,j,k)$. Para simplificar o algoritmo, tanto o sistema como a região meio poroso são paralelepipedais.

Inicialização das variáveis dimensionais e de processo:

<i>faça: MAX=2¹⁴ - 1</i>	<i>{se a matriz C(i,j,k) é do tipo "int"}</i>
<i>faça: RMIN=RMIN</i>	<i>{O menor valor que o raio rⁱ assume durante o processo}</i>
<i>faça: RMAX=RMAX</i>	<i>{O maior valor que o raio rⁱ assume durante o processo}</i>
<i>faça: nx=nx</i>	<i>{dimensão no eixo x da região meio poroso}</i>
<i>faça: ny=ny</i>	<i>{dimensão no eixo y da região meio poroso}</i>
<i>faça: nz=nz</i>	<i>{dimensão no eixo z da região meio poroso}</i>
<i>faça: CA=CA</i>	<i>{CA = 1 se o fluido A é idealmente compressível e CA=0 se o fluido A é idealmente incompressível}</i>
<i>faça: NM=NM</i>	<i>{NM = 1 se o fluido A é não molhante e NM=0 se o fluido A é molhante}</i>
<i>faça: DA=(RMAX+1)</i>	
<i>faça: DB=(2*RMAX+1)</i>	<i>{As dimensões DA e DB devem possuir no mínimo estes valores de forma que as interfaces na superfície superior do meio poroso possam ser determinadas corretamente, como visto no capítulo4}</i>
<i>faça: DC=(3)</i>	<i>{Espessura da membrana}</i>
<i>faça: DD=(DC+2)</i>	<i>{Espessura da câmara inferior contando a espessura da membrana}</i>
<i>faça: NX+(nx+DA+DA)</i>	<i>{Dimensão no eixo x do sistema completo}</i>
<i>faça: NY+(ny+DB+DD)</i>	<i>{Dimensão no eixo y do sistema completo}</i>
<i>faça: NZ+(nz+DA+DA)</i>	<i>{Dimensão no eixo z do sistema completo}</i>

Inicialização das variáveis de auxílio dos loops:

{ Os vetores xx[], yy[] e zz[] definidos desta maneira permitem um deslocamento à um determinado elemento (x,y,z). Por exemplo, se for necessário acessar o valor do elemento (x-1,y-1,z-1) basta utilizar os vetores xx[], yy[], zz[] da forma (x+xx[0],y+yy[0],z+zz[0]). Muito embora estes vetores sejam desnecessários, possibilitam um código mais "enxuto". A variável vv[t] possui como valor a distância (ao quadrado) entre o elemento (x,y,z) e o elemento (x+xx[t],y+yy[t],z+zz[t]). }

Faça:

```

xx[0]= -1 ,      yy[0]= -1 ,      zz[0]= -1 ,      vv[0]=3,
xx[1]= -1 ,      yy[1]= -1 ,      zz[1]= 0 ,      vv[1]=2,
xx[2]= -1 ,      yy[2]= 0 ,      zz[2]= -1 ,      vv[2]=2,
xx[3]= 0 ,      yy[3]= -1 ,      zz[3]= -1 ,      vv[3]=2,
xx[4]= -1 ,      yy[4]= 0 ,      zz[4]= 0 ,      vv[4]=1,
xx[5]= 0 ,      yy[5]= -1 ,      zz[5]= 0 ,      vv[5]=1,
xx[6]= 0 ,      yy[6]= 0 ,      zz[6]= -1 ,      vv[6]=1,

```

{São necessárias 8 passagens no sistema para a determinação da DRQF, cada passagem partindo de um dos vértices do cubo em direção ao vértice oposto. É possível utilizar os vetores $invx[]..invz[]$ em conjunto com os vetores $xx[]..zz[]$ para considerar, em cada uma destas passagens, os elementos vizinhos de interesse. Por exemplo, se numa das passagens se quer acessar o elemento $(x+2,y,z)$ basta utilizar os vetores da forma $(x+2*invx[4]*xx[4],y+2*invy[4]*yy[4],z+2*invz[4]*zz[4])$. A utilização destes vetores em conjunto simplifica enormemente o código.}

Faça:

```

invx[0]= +1 ,      invy[0]= +1 ,      invz[0]= +1
invx[1]= -1 ,      invy[1]= -1 ,      invz[1]= -1,
invx[2]= -1 ,      invy[2]= +1 ,      invz[2]= +1,
invx[3]= +1 ,      invy[3]= -1 ,      invz[3]= -1
invx[4]= +1 ,      invy[4]= -1 ,      invz[4]= +1,
invx[5]= -1 ,      invy[5]= +1 ,      invz[5]= -1,
invx[6]= +1 ,      invy[6]= +1 ,      invz[6]= -1,
invx[7]= -1 ,      invy[7]= -1 ,      invz[7]= +1,

```

Na determinação de DRF (utilizando a métrica d_{345}) são necessárias apenas dois percursos na matriz, em cada elemento deve-se verificar seus 13 elementos vizinhos que já foram percorridos naquela passada. Para tornar o código mais enxuto utiliza-se a máscara M.

Faça:

```

Mx[0]= 1,      My[0]= 1,      Mz[0]= 1,      M[0]= 5
Mx[1]= 0,      My[1]= 1,      Mz[1]= 1,      M[1]= 4
Mx[2]= -1,     My[2]= 1,      Mz[2]= 1,      M[2]= 5
Mx[3]= 1,      My[3]= 0,      Mz[3]= 1,      M[3]= 4

```

$Mx[4]= 0,$	$My[4]= 0,$	$Mz[4]= 1,$	$M[4]= 3$
$Mx[5]= -1,$	$My[5]= 0,$	$Mz[5]= 1,$	$M[5]= 4$
$Mx[6]= 1,$	$My[6]= -1,$	$Mz[6]= 1,$	$M[6]= 5$
$Mx[7]= 0,$	$My[7]= -1,$	$Mz[7]= 1,$	$M[7]= 4$
$Mx[8]= -1,$	$My[8]= -1,$	$Mz[8]= 1,$	$M[8]= 5$
$Mx[9]= 1,$	$My[9]= 1,$	$Mz[9]= 0,$	$M[9]= 4$
$Mx[10]= 0,$	$My[10]= 1,$	$Mz[10]= 0,$	$M[10]= 3$
$Mx[11]= -1,$	$My[11]= 1,$	$Mz[11]= 0,$	$M[11]= 4$
$Mx[12]= 1,$	$My[12]= 0,$	$Mz[12]= 0,$	$M[12]= 3$

Inicialização da matriz $C[i][j][k]$:

{O meio poroso pode estar armazenado em um arquivo, saída de um software de reconstrução tridimensional ou dados de microtomografia, ou pode ser gerado pelo próprio programa, no caso de alguma geometria simples ou reconstrução por diagênese gráfica. De qualquer forma a representação deve ser uma matriz paralelepipedal de dimensões n_x, n_y e n_z . Estas informações devem ser atribuídas á matriz $C[i][j][k]$ no intervalo (DA até DA+ n_x-1 , DB até DB+ n_y-1 , DA até DA+ n_z-1). Por exemplo, considere que a matriz $M[i][j][k]$ contém a representação binária da região meio poroso (não é necessária a utilização desta matriz uma vez que ou as informações são lidas de arquivos ou podem ser geradas diretamente pelo programa na matriz $C[i][j][k]$.)}

faça $i=0$ até n_x-1

faça $j= 0$ até n_y-1

faça $k= 0$ até n_z-1

faça $C[i+DA][j+DB][k+DA]=M[i][j][k]$

{É atribuído o rótulo 1 às câmaras superior e inferior}

faça $i=0$ até $NX-1$

faça $k=0$ até NZ

faça $j=0$ até DB

faça $C[i][j][k]=1$

faça $j=DB+n_y$ até $NY-1$

faça $C[i][j][k]=1$

{As fronteiras do sistema devem possuir rótulo 0, ou seja, devem representar uma parede sólida}

```

faça i=0 até NX-1
  faça j=0 até NY-1
    faça C[i][j][0]=0
    faça C[i][j][NZ-1]=0
  faça k=0 até NZ-1
    faça C[i][0][k]=0
    faça C[i][NY-1][k]=0
  faça k=0 até NZ-1
    faça j=0 até NY-1
      faça C[0][j][k]=0
      faça C[NX-1][j][k]=0

```

{ A parede que envolve o meio poroso e separa as câmaras superior e inferior deve possuir rótulo 0}

```

faça k=0 até NZ-1
  faça j = DB até DB+ny-1
    faça i = 0 até DA-1
      faça C[i][j][k]=0
    faça i = DA+nx até NX-1
      faça C[i][j][k]=0
  faça i = DA até DA+nx-1
    faça j = DB até DB+ny-1
      faça k=0 até DA-1
        faça C[i][j][k]=0
      faça k=DA+nz até NZ-1
        faça C[i][j][k]=0

```

{ A parte sólida da membrana deve possuir rótulo 0}

```

faça i=0 até NX-1 incrementando i de 2 em 2
  faça j=DB+ny até DB+DC+ny-1
    faça k=0 até NZ-1 incrementando k de 2 em 2
      faça C[i][j][k]=0

```


faça i=1 até NX-1 incrementando i de 2 em 2
faça j=DB+ny até DB+DC+ny-1
faça k=1 até NZ-1 incrementando k de 2 em 2
faça C[i][j][k]=0

{Ao término deste algoritmo tem-se o meio poroso envolvido corretamente pelas câmaras, paredes e membranas. O sistema é representado pela matriz C que possui como valor o rótulo 0 para os elementos que representam o sólido e rótulo 1 para os elementos que representam a fase fluidica. As variáveis de auxílio de looping, dimensionais e de processo estão inicializadas com seus respectivos valores}

A.3- ALGORITMO DO LOOPING GERAL

Uma vez inicializada a matriz C e as outras variáveis de interesse, esta parte do algoritmo apenas determina o raio em questão para cada passo do processo e acessa outras partes do algoritmo para que a matriz C seja adequadamente transformada.

$r_inicial = NM * RMIN + (1 - NM) * RMAX$ *{o raio inicial assume o valor RMIN ou RMAX dependendo do molhamento da região A}*
 $r_final = NM * RMAX + (1 - NM) * RMIN$ *{semelhante ao comentário anterior}*
 $inc = 2 * NM - 1$ *{O incremento é positivo ou negativo dependendo do molhamento da região A. Uma vez que se deseja minimizar os efeitos dinâmicos o módulo do incremento é sempre 1. Isto pode ser facilmente modificado alterando o módulo do valor do incremento}*
faça raio=r_inicial até r_final com incremento inc
 inclua aqui o algoritmo da seção A.4 (métrica euclidiana) ou
 algoritmo da seção A.7 (métrica d_{345})
 inclua aqui o algoritmo da seção A.5 (métrica euclidiana) ou
 algoritmo da seção A.8 (métrica d_{345})
 inclua aqui o algoritmo da seção A.6

A.4- ALGORITMO PARA A DETERMINAÇÃO DE DRQF (métrica euclidiana)

O algoritmo apresentado a seguir permite transformar uma imagem ternária (C^i) cuja fronteira contenha somente elementos com rótulo 0 em uma imagem de distância rotulada (ao quadrado) ao fundo, DRQF(C^i). Quando $r=r_inicial$ (primeira passada no looping da seção A.3)

não existe região amarela (passo inicial). Porém nas demais passadas esta região pode existir (se $c_A=0$). O algoritmo é geral e trabalha se a região amarela existir ou não existir.

{Neste algoritmo sabe-se que um elemento pertence à região amarela se a DRQF deste elemento é maior que MAX. Portanto deve-se alterar o valor dos elementos que possuem rótulo 2 para $(1+MAX)$. Os elementos que possuem rótulo 0 e 1 permanecem com o mesmo valor.}

faça $i=0$ até $NX-1$

faça $j=0$ até $NY-1$

faça $k=0$ até $NZ-1$

se $C[i][j][k]=2$ faça $C[i][j][k]=1+MAX$

faça $t=0$ até 7

{t representa uma das oito passadas em C}

faça $x_inicial=((1+invx[t])+(1-invz[t])(NX-2))/2$*

faça $y_inicial=((1+invy[t])+(1-invy[t])(NY-2))/2$*

faça $z_inicial=((1+invz[t])+(1-invz[t])(NZ-2))/2$ {Os valores iniciais do looping são o começo ou o final de C, dependendo do percurso t, que é caracterizado pelos vetores $invx[]..inz[]$.}*

faça $x_final=((1-invz[t])+(1+invx[t])(NX-2))/2$*

faça $y_final=((1-invy[t])+(1+invy[t])(NY-2))/2$*

faça $z_final=((1-invz[t])+(1+invz[t])(NZ-2))/2$ {Semelhante ao comentário anterior}*

faça $incx=invx[t]$

faça $incy=invy[t]$

faça $incz=invz[t]$ {Os incrementos são positivos ou negativos dependendo do percurso t}

faça $x=x_inicial$ até x_final com incremento $incx$

faça $y=y_inicial$ até y_final com incremento $incy$

faça $z=z_inicial$ até z_final com incremento $incz$ {este looping passa em todos elementos centrais de C utilizando o percurso t}

se $C[x][y][z] \neq 0$ faça: {Se $C[x][y][z]=0$ então $DRQF(x,y,z)=0$ }

se $t=0$ faça $d=MAX+1$ { Na primeira passada $C[x][y][z]$ possui o rótulo representando a que região pertence. Portanto atribui-se o valor MAX para $DQF(x,y,z)$ na esperança de que seja encontrado um valor menor que MAX no decorrer dos 8 percursos.}

se $t \neq 0$ faça $d=Proprio(C[x][y][z])$ {Nas demais passadas, que não a primeira, o valor de $C[x][y][z]$ já é a DQF para os passos

anteriores. E portanto atribui-se este valor à d com a esperança de se encontrar um valor inferior na passada t em questão.}

faça $m=0$ até 6 {este looping permite que os 3 vizinhos de interesse, face comum, sejam acessados}

$b[m]=\text{Proprio}(C[x+\text{invx}[t]*xx[m]][y+\text{invy}[t]*yy[m]][z+\text{invz}[t]*zz[m]])$
 { $b[m]$ é o valor dos primeiros vizinhos}

se $b[m] = 0$ e $vv[m] < d$ faça $d=vv[m]$ { Se $b[m]=0$ então d é a distância de dois elementos vizinhos deslocados pelos vetores $xx[m]..zz[m]$. Isto se $vv[m]$ for menor que a DQF de $C[x][y][z]$ }

se $b[m] \neq 0$ e $m > 3$ faça: {Se $b[m] \neq 0$ deve-se utilizar a relação 4.12}

$a[m]=\text{Proprio}(C[x+2*\text{invx}[t]*xx[m]][y+2*\text{invy}[t]*yy[m]]...$
 $...[z+2*\text{invz}[t]*zz[m]])$ { $a[m]$ é o valor dos primeiros vizinhos}

$c[m]=2*b[m]-a[m]+2*vv[m]$ {relação 4.12}

se $b[m] > a[m]$ e $c[m] < d$ faça $d=c[m]$ {a relação 4.12 apenas pode ser utilizada neste algoritmo se os primeiros vizinhos possuírem valor maior que os segundos. Se isto ocorrer e $c[m]$ for menor que a DQF dos passos anteriores então $d=c[m]$ }

se $d > \text{MAX}$ faça $d=\text{MAX}$ {Pode ser que o valor de d , nas passadas que não a final, seja maior que MAX . E existe a possibilidade de se encontrar um valor menor nas próximas passadas. O valor de d não pode ser maior que M para que o elemento em questão não seja reconhecido como um elemento da região amarela, caso não pertença a esta.}

se $d=\text{MAX}$ e $t=7$ então saia do algoritmo {o tipo "int" não é suficiente para este tamanho de poro. Aumente o tipo de C para "long int", e consequentemente o valor de MAX }

faça $C[x][y][z] = d$ {Se na passada foi encontrado um valor de d menor que o DQF(x,y,z) anterior então este é o novo valor de DQF(x,y,z)}

se $|C[x][y][z]| > \text{MAX}$ faça $C[x][y][z] = d + \text{MAX}$ {Se o elemento (x,y,z)

*pertence à região amarela,
acrescente MAX ao seu valor, desta
forma obtém-se $DRQF(x,y,z)$*

A função $Próprio(p)$, onde p é um valor de DRQF, retorna o valor de DQF:

{ Até esta parte, DQRF é sempre um valor positivo, no entanto utiliza-se o módulo de p porque esta função também é utilizada por outras partes do algoritmo }

Próprio(p)

se $|p| > MAX$ retorna $|p| - MAX$

se $|p| \leq MAX$ retorna $|p|$

A.5- ALGORITMO PARA A OBTENÇÃO DE G^i e \underline{G}^i (utilizando a métrica euclidiana)

O algoritmo apresentado a seguir permite a obtenção da região G^i tendo-se como dado de entrada uma imagem rotulada de distância (ao quadrado) ao fundo, DQF, com dimensões NX, NY e NZ. Transforma-se uma DRQF em uma imagem rotulada. Se o rótulo for 0 o elemento pertence ao sólido, se for 1 o elemento pertence à $(G^i \cap P)$, se for 2 pertence à $(\underline{G}^i \cap P)$, se for 3 pertence à Y^i , se for 4 pertence à $(B^0 \cap L)$ e se for 5 pertence à $(A^0 \cap L)$. Ver figura A.1.

A parte de determinação de $(\cup_x E^{*i}_x)$ é uma modificação do caso bidimensional para o tridimensional do algoritmo apresentado em Moschetto (1991). Uma diferença fundamental é que naquele caso são necessárias duas matrizes, uma com o valor de DF e a outra rotulada indicando se o elemento pertence ou não à região $(\cup_x E^{*i}_x)$. No algoritmo apresentado neste trabalho apenas uma matriz é necessária.

{Inicializa-se com valor 0 a matriz $V[x][y]$ }

faça $x=0$ até raio

faça $y=0$ até raio

faça $V[x][y]=0$

{Para acelerar o processo deve-se desenhar uma bola com o raio determinado no looping geral. Esta bola é armazenada, de forma compactada na matriz $V[x][y]$ }

faça x=0 até raio

faça y=0 até raio

faça z=0 até raio

Se $(x*x + y*y + z*z) \leq \text{raio}^2$ faça $V[x][y] = V[x][y] + 1$

{Neste looping percorre-se todos os elementos centrais de C. Se um elemento possui DQF maior que $(\text{raio}+1)^2$ então certamente este pertence à região $(\cup_x E^*_x)$. Se o elemento possui valor menor ou igual a $(\text{raio}+1)^2$ e maior que raio^2 então este elemento é o centro de uma bola que tangencia o sólido, e portanto desenha-se uma bola centrada nestes elementos. No final do looping os elementos que pertencem à $(\cup_x E^*_x)$ possuem valor $C[x][y][z]$ negativos.}

faça x=1 até NX-2

faça y=1 até NY-2

faça z=1 até NZ-2 {este looping percorre todos os elementos centrais de C}

se $\text{Próprio}(C[x][y][z]) > (\text{raio}+1)^2$ faça $C[x][y][z] = -|C[x][y][z]|$

se $\text{Próprio}(C[x][y][z]) \leq (\text{raio}+1)^2$ e $\text{Próprio}(C[x][y][z]) > \text{raio}^2$ faça:

faça i = - raio até + raio {Este looping desenha a bola centrada em (x,y,z)}

faça j = -V[|i|][0] até -V[|i|][0]

faça k = -V[|i|][|j|] até -V[|i|][|j|]

faça $C[x+i][y+j][z+k] = -|C[x+i][y+j][z+k]|$

{Deve-se conhecer o local das câmaras, isto é um dado do problema. O próximo looping dá o rótulo 4 para a câmara que contém o fluido B e o rótulo 5 para a câmara que contém o fluido A. Pela maneira como foi gerado o sistema, o fluido molhante deve sempre estar na câmara inferior.}

Se NM=0 faça

cor[0]=5

cor[1]=4

Se NM=1 faça

cor[0]=4

cor[1]=5

faça x=1 até NX-2

faça z=1 até NZ-2

faça y=1 até DB-1

$C[x][y][z] = \text{cor}[0]$
 $C[x][NY-2][z] = \text{cor}[1]$

{No próximo looping é atribuído o valor 1 para os elementos no interior das cavidades que pertencem à região verde, rótulo 2 para os elementos que pertencem à região verde complementar e rótulo 3 para os que pertencem à região amarela }

faça x=DA até DA+nx-1

faça y=DB até DN+ny+DC-1

faça z=DA até DA+nz

se $|C[x][y][z]| > \text{MAX}$ faça $C[x][y][z] = 3$
se $|C[x][y][z]| \leq \text{MAX}$ e $C[x][y][z] > 0$ faça $C[x][y][z] = 2$
se $|C[x][y][z]| \leq \text{MAX}$ e $C[x][y][z] < 0$ faça $C[x][y][z] = 1$

A.6- ALGORITMO PARA A OBTENÇÃO DE A^i e B^i

Neste algoritmo obtém-se, a partir de $C[i][j][k]$ determinado no algoritmo da seção A.5, uma C cujos elementos possuem rótulo 0 se pertencem ao sólido, 3 se pertencem à região amarela, 4 se pertencem à região B e 5 se pertencem à região A. Neste momento procede-se a contagem dos poros de interesse ou se armazena as configurações de equilíbrio em arquivos.

Após a extração dos dados de interesse os rótulos são transformados para se tornarem adequados ao algoritmo da seção A.4, no próximo raio do loop geral.

{O loop principal desta parte do algoritmo determina as partes de uma determinada região que possuem conectividade com outra região. Por exemplo, determina a parte da região com rótulo 1 que possui conectividade com a região de rótulo 4, e então transforma esta parte de forma que seus elementos passem a possuir o rótulo 4. Dependendo do tipo de processo podem ser necessárias várias determinações deste tipo. A variável np (número de passagens) determina quantas determinações são necessárias para um determinado tipo de processo. O vetor p[] contém informações sobre quais determinações serão feitas. E os vetores CorA[], CorB[], CorC[] determinam os rótulos em questão em cada uma das transformações.}

Faça:

$\text{CorA}[1]=4$	$\text{CorB}[1]=1$	$\text{CorC}[1]=1$
$\text{CorA}[2]=4$	$\text{CorB}[2]=2$	$\text{CorC}[2]=2$
$\text{CorA}[3]=5$	$\text{CorB}[3]=1$	$\text{CorC}[3]=2$
	$\text{CorB}[4]=1$	$\text{CorC}[4]=2$

Se $CA=1$ faça $CorA[4]=5$

Se $CA=0$ faça $CorA[4]=3$

Se $NM=0$ e $CA=1$ faça

$np=1$

$p[1]=1$

Se $NM=1$ e $CA=1$ faça

$np=2$

$p[1]=1$

$p[2]=2$

Se $NM=0$ e $CA=0$ faça

$np=2$

$p[1]=1$

$p[2]=3$

Se $NM=1$ e $CA=0$ faça

$np=3$

$p[1]=1$

$p[2]=2$

$p[3]=3$

faça $pas=1$ até np

{Este é o loop principal desta parte do algoritmo}

faça $cont=0$

faça $contant=1$

enquanto ($cont \neq contant$) faça

faça $contant=cont$

faça $t=0$ até 1 {este loop possibilita percorrer a matriz C em dois sentidos opostos}

faça $inc=invx[t]$

faça $x_inicial=((1+invx[t])*DA+(1-invz[t])*(DA+nx-1))/2$

faça $y_inicial=((1+invy[t])*DB+(1-invz[t])*(DB+ny+DC-1))/2$

faça $z_inicial=((1+invz[t])*DA+(1-invz[t])*(DA+nz-1))/2$

faça $x_final=((1-invz[t])*DA+(1+invx[t])*(DA+nx-1))/2$

faça $y_final=((1-invz[t])*DB+(1+invy[t])*(DB+ny+DC-1))/2$

faça $z_final=((1+invz[t])*DA+(1+invz[t])*(DA+nz-1))/2$

faça $x=x_inicial$ até x_final com incremento inc

faça $y=y_inicial$ até y_final com incremento inc

faça $z=z_inicial$ até z_final com incremento inc

faça $m=4$ até 6

se $C[x][y][z]=CorB[p[pas]]$ ou $C[x][y][z]=CorC[p[pas]]$

se $C[x+invx[t]*xx[m]][y+invy[t]*yy[m]][z+invz[t]*zz[m]]=$

$=CorA[p[pas]]$ faça
 $cont=cont+1$
 $C[x][y][z]=CorA[p[pas]]$

{ Agora é necessária a transformação dos rótulos desnecessários nos rótulos das configurações }

faça $x=DA$ até $DA+nx-1$

faça $y=DB$ até $DN+ny+DC-1$

faça $z=DA$ até $DA+nz$

se $C[x][y][z]=CorB[4]$ ou $C[x][y][z]=CorC[4]$ faça $C[x][y][z] = CorA[4]$

{ Neste momento é possível extrair os dados. Ou gravando as configurações em arquivos ou contando os pixels e calculando a saturação, por exemplo }

Chame a função de extração de dados

{ E finalmente a matriz C deve ser transformada de modo a se adequar ao próximo passo do loopinf geral }

faça $x=1$ até $NX-2$

faça $y=1$ até $NY-2$

faça $z=1$ até $NZ-2$

se $C[x][y][z]=4$ ou $C[x][y][z]=5$ faça $C[x][y][z]=1$

se $C[x][y][z]=3$ faça $C[x][y][z]=2$

A.7- ALGORITMO PARA A DETERMINAÇÃO DE DRF (métrica d_{345})

O algoritmo apresentado a seguir permite transformar uma imagem ternária (C^i) cuja fronteira contenha somente elementos com rótulo 0 em uma imagem de distância rotulada ao fundo, $DRF(C^i)$. Quando $r=r_{\text{inicial}}$ (primeira passada no looping da seção A.3) não existe região amarela (passo inicial). Porém nas demais passadas esta região pode existir (se $c_A=0$). O algoritmo é geral e trabalha se a região amarela existir ou não existir.

{ Neste algoritmo sabe-se que um elemento pertence à região amarela se a DQF deste elemento é maior que MAX. Portanto deve-se alterar o valor dos elementos que possuem rótulo 2 para $(1+MAX)$. Os elementos que possuem rótulo 0 e 1 permanecem com o mesmo valor. }

```

faça i=0 até NX-1
  faça j=0 até NY-1
    faça k=0 até NZ-1
      se C[i][j][k]=2 faça C[i][j][k]=1+MAX

faça i=1 até NX-2
  faça j=1 até NY-2
    faça k=1 até NZ-2 {Este é o looping do primeiro percurso}
      se C[i][j][k]≠0 faça:
        d=MAX;
        faça t=0 até 12
          se Proprio(C[x-Mx[t]][y-My[i]][z-M[i]])+Mp[i] < d faça:
            d= Proprio(C[x-Mx[t]][y-My[i]][z-M[i]])+Mp[i] {Aqui aplica-se
              a equação 4.14}
          se C[i][j][k]>MAX faça C[i][j][k]=d+MAX
          se não faça C[i][j][k]=d

faça i=NX-2 até 1
  faça j=NY-2 até 1
    faça k=NZ-2 até 1 {Este é o looping do segundo percurso}
      se C[i][j][k]≠0 faça:
        d=C[i][j][k]
        faça t=0 até 12
          se Proprio(C[x+Mx[t]][y+My[i]][z+M[i]])+Mp[i] < d faça:
            d= Proprio(C[x+Mx[t]][y+My[i]][z+M[i]])+Mp[i] {Aqui aplica-se
              a equação 4.14}
          se C[i][j][k]>MAX faça C[i][j][k]=d+MAX
          se não faça C[i][j][k]=MAX

```

A.8- ALGORITMO PARA A OBTENÇÃO DE G^i e \underline{G}^i (utilizando a métrica d_{345})

O algoritmo apresentado a seguir permite a obtenção da região G^i tendo-se como dado de entrada uma imagem rotulada de distância (ao quadrado) ao fundo, DF, com dimensões NX, NY e NZ. Transforma-se uma DRF em uma imagem rotulada. Se o rótulo for 0 o elemento pertence

ao sólido, se for 1 o elemento pertence à $(G^i \cap P)$, se for 2 pertence à $(\underline{G}^i \cap P)$, se for 3 pertence à Y^i , se for 4 pertence à $(B^0 \cap L)$ e se for 5 pertence à $(A^0 \cap L)$. Ver figura A.1.

A parte de determinação de $(\cup_x E^{*i}_x)$ é uma modificação do caso bidimensional para o tridimensional do algoritmo apresentado em Moschetto (1991). Uma diferença fundamental é que naquele caso são necessárias duas matrizes, uma com o valor de DF e a outra rotulada indicando se o elemento pertence ou não à região $(\cup_x E^{*i}_x)$. No algoritmo apresentado neste trabalho apenas uma matriz é necessária.

{Inicializa-se com valor 0 a matriz $V[x][y]$ }

faça $x=0$ até raio

faça $y=0$ até raio

faça $V[x][y]=0$

{Para acelerar o processo deve-se desenhar uma bola com o raio determinado no looping geral. Esta bola é armazenada, de forma compactada na matriz $V[x][y]$ }

faça $x=0$ até raio

faça $y=0$ até raio

faça $z=0$ até raio

se $x \geq y$ e $x \geq z$ então faça $d=3x+y+z$

se não se $y \geq z$ e $y > x$ faça $d=3y+x+z$

se não faça $d=3z+x+y$

se $d \geq 3 \cdot \text{raio}$ faça $V[x][y] = V[x][y] + 1$

*{Neste looping percorre-se todos os elementos centrais de C. Se um elemento possui DF maior que $(3 \cdot \text{raio} + 1)$ então certamente este pertence à região $(\cup_x E^{*i}_x)$. Se o elemento possui valor menor ou igual a $(3 \cdot \text{raio} + 1)$ e maior que $3 \cdot \text{raio}$, então este elemento é o centro de uma bola que tangencia o sólido, e portanto desenha-se uma bola centrada nestes elementos. No final do looping os elementos que pertencem à $(\cup_x E^{*i}_x)$ possuem valor $C[x][y][z]$ negativos.}*

faça $x=1$ até $NX-2$

faça $y=1$ até $NY-2$

faça $z=1$ até $NZ-2$

{este looping percorre todos os elementos centrais de C}

se $\text{Próprio}(C[x][y][z]) > (3.\text{raio}+1)$ faça $C[x][y][z] = -|C[x][y][z]|$

se $\text{Próprio}(C[x][y][z]) \leq (3.\text{raio}+1)$ e $\text{Próprio}(C[x][y][z]) > 3.\text{raio}$ faça:

faça $i = -\text{raio}$ até $+\text{raio}$ {Este looping desenha a bola centrada em (x,y,z) }

faça $j = -V[|i|][0]$ até $-V[|i|][0]$

faça $k = -V[|i|][|j|]$ até $-V[|i|][|j|]$

faça $C[x+i][y+j][z+k] = -|C[x+i][y+j][z+k]|$

{Deve-se conhecer o local das câmaras, isto é um dado do problema. O próximo looping dá o rótulo 4 para a câmara que contém o fluido B e o rótulo 5 para a câmara que contém o fluido A. Pela maneira como foi gerado o sistema, o fluido molhante deve sempre estar na câmara inferior.}

Se $NM=0$ faça

$cor[0]=5$

$cor[1]=4$

Se $NM=1$ faça

$cor[0]=4$

$cor[1]=5$

faça $x=1$ até $NX-2$

faça $z=1$ até $NZ-2$

faça $y=1$ até $DB-1$

$C[x][y][z]=cor[0]$

$C[x][NY-2][z]=cor[1]$

{No próximo looping é atribuído o valor 1 para os elementos no interior das cavidades que pertencem à região verde, rótulo 2 para os elementos que pertencem à região verde complementar e rótulo 3 para os que pertencem à região amarela }

faça $x=DA$ até $DA+nx-1$

faça $y=DB$ até $DN+ny+DC-1$

faça $z=DA$ até $DA+nz$

se $|C[x][y][z]| > MAX$ faça $C[x][y][z]=3$

se $|C[x][y][z]| \leq MAX$ e $C[x][y][z] > 0$ faça $C[x][y][z]=2$

se $|C[x][y][z]| \leq MAX$ e $C[x][y][z] < 0$ faça $C[x][y][z]=1$

APÊNDICE B - MÉTODO DE RECONSTRUÇÃO DE JOSHI

A idéia deste método, exposto em Quiblier (1984) é conseguir gerar um meio poroso, por processo de Monte Carlo, que mantenha certas características das micrografias. Neste modelo, interessa que o meio poroso obtido mantenha a Função Distribuição de Probabilidade e a Função Autocorrelação Espacial.

B.1- HIPÓTESES

Listam-se agora as hipóteses sobre o meio poroso para utilização deste modelo.

- O meio poroso é assumido estacionário e isotrópico.
- Todas as informações sobre a geometria do meio poroso estão representadas pela Função Distribuição de Probabilidade e pela Função Autocorrelação.
- A porosidade ótica é capaz de representar a porosidade real do meio poroso.
- Tanto a Função Distribuição de Probabilidade como a Função Autocorrelação se mantêm inalteradas se observadas bi ou tridimensionalmente.

A.2- OBTENÇÃO DA FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE PROBABILIDADE (PDF_Z)

No processo de análise de imagens a micrografia é digitalizada. Para cada pixel, o software faz corresponder 0 ou 1 (no caso do processo apenas diferenciar intensidades acima ou abaixo de um certo limite), ou valores entre 0 e 1 (no caso do processo conseguir diferenciar vários graus de intensidade luminosa) - estes valores são armazenados na matriz $z(P)$. No primeiro caso, a PDF_Z é um escalar representando a porosidade ótica. No segundo caso (se limitam-se as intensidades em um certo número de classes), a PDF_Z é um histograma.

A.3- OBTENÇÃO DA FUNÇÃO AUTO CORRELAÇÃO (F_Z)

A definição da f_z para a matriz $z(P)$ de valores de intensidade de luz obtido por meio da análise da micrografia é:

$$f_z(H) = \frac{E\{[z(P+h) - m] \cdot [z(P) - m]\}}{E\{[z(P) - m]^2\}} \quad (B.1)$$

Onde $E\{\}$ é o valor esperado da variável aleatória, $z(P)$ é a intensidade de luz no ponto P , m é a porosidade (média) ótica e H é um vetor deslocamento a partir do ponto P . Uma vez que supõe-se o meio poroso ser isotrópico, H pode ser considerado um escalar h . Nota-se que o denominador é a variância do conjunto de todos os pontos $z(P)$.

A.4- OBTENÇÃO DO MEIO POROSO ATRAVÉS DA PDF_Z e f_z

Agora de posse da PDF_Z e da f_z pode-se gerar, por meio de um processo randômico, o meio poroso tridimensional.

Em primeiro lugar, gera-se por Monte Carlo uma matriz tridimensional X . Os valores $x(i,j,k)$ devem ser totalmente descorrelacionados e formar uma população gaussiana com média 0 e variância 1.

Considera-se agora um domínio vizinho de cada ponto (i,j,k) composto pelos pontos $(i+r,j+s,k+t)$ acima dos quais a f_z se torna negligenciável. Os valores $x(i+r,j+s,k+t)$ são então linearmente combinados para formarem outra matriz $y(i,j,k)$ definida por:

$$y(i, j, k) = \sum_{r,s,t} a(r, s, t) \cdot x(i + r, j + s, k + t) \quad (\text{B.2})$$

O conjunto Y ainda é gaussiano, no entanto seus elementos são correlacionados. Escolhendo apropriadamente os valores $a(r, s, t)$ pode-se gerar qualquer f_y . O processo que leva de X à Y é chamado filtro linear, e o procedimento de determinação dos coeficientes é explicado abaixo. A média de Y continua sendo 0, e normalizando os coeficientes a's, pode-se fazer com que a sua variância seja igual a 1. Logo f_y é:

$$f_y(u, v, w) = E[y(i, j, k) \cdot y(i + u, j + v, k + w)] \quad (\text{B.3})$$

Substituindo y por sua equação em função de x e sabendo que:

$$E[x(l, m, n) \cdot x(u, v, w)] = \begin{cases} 1 & \text{se todos os índices forem iguais} \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

chega-se a um sistema não-linear em que pode-se determinar os coeficientes a's em função de f_y (desde que se conheça f_y). A determinação de f_y é vista adiante.

O próximo passo é passar Y por um filtro não-linear e chegar à Z (que é o meio poroso reconstituído e que deve possuir as f_z e PDF_z da micrografia do meio poroso real).

O filtro não-linear é a passagem de um valor $y(i, j, k)$ para um valor $z(i, j, k)$, da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{y(i, j, k)} \text{PDF}_y(t) dt = \int_0^{z(i, j, k)} \text{PDF}_z(t) dt \quad (\text{B.5})$$

Resta agora determinar a $f_y(u, v, w)$ em função da $f_z(u, v, w)$ (medida) de forma que ao passar a Y pelo filtro não-linear a Z obtida possua a PDF_z e a f_z da micrografia. Para alcançar este objetivo deve-se determinar a f_y de maneira apropriada. Segundo Adler, Jacquin e Quiblier (1990), a variável aleatória $(Y(x), Y(x+u))$ é uma gaussiana bivariada com densidade de probabilidade conhecida; esta densidade pode ser expandida em termos de polinômios de Hermite. Pode-se então exprimir f_z em função de f_y , como segue:

$$f_z = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^2 [f_y]^m \quad (\text{B.6})$$

Uma vez que se conhece a f_z (obtida das micrografias) e pode-se calcular os coeficientes C 's, obtém-se a f_y ; e a partir desta podem-se determinar os coeficientes a 's (como visto acima). Com os coeficientes a 's, gera-se o meio poroso tridimensional a partir de uma matriz gaussiana normal não-correlacionada X passada pelo filtro linear e pelo filtro não-linear.

Deixa-se claro que o desenvolvimento da equação funcional que relaciona f_z à f_y , de forma a obter as características desejadas em Z , não é apresentado em Quiblier (1984). Desta forma, embora se possa aplicá-la, não se pode verificar que condições foram assumidas (se é que foram).

Mostra-se agora o cálculo dos C 's.

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi} m!} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} c(u) H_m(u) du \quad (\text{B.7})$$

onde $H_m(u)$ é o polinômio de Hermite de grau m definido por:

$$H_m(u) = (-1)^m e^{u^2/2} \frac{d^m}{du^m} [e^{-u^2/2}] \quad (\text{B.8})$$

e $c(u)$ é computado da seguinte maneira:

$$\int_0^{c(u)} \text{PDF}_z(t) dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^u e^{-\frac{t^2}{2}} dt \quad (\text{B.9})$$

A.5- Conclusão

Resumindo, tem-se o seguinte procedimento para reconstituição de um meio poroso tridimensional a partir da micrografia de um meio poroso real.

- Gera-se uma matriz X , normalmente distribuída e totalmente descorrelacionada.
- Calculam-se os coeficientes C 's a partir da PDF_z obtida das micrografias.
- Calcula-se f_y através da equação funcional.

- Calculam-se os coeficientes a 's.
- Com os coeficientes a 's, determina-se Y passando X pelo filtro linear.
- Passa-se então Y pelo filtro não-linear e finalmente obtém-se uma população $z(i,j,k)$ que possui as f_z e PDF_z das micrografias.

Explicações detalhadas, comentários e avaliações do método são apresentadas em Quiblier(1984), Adler, Jacquin e Quiblier(1990) e Fernandes(1994).